

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À  
L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À TROIS-RIVIÈRES

COMME EXIGENCE PARTIELLE  
DE LA MAÎTRISE EN SCIENCES DE L'ÉNERGIE ET DES MATÉRIAUX OFFERTE  
EN EXTENSION PAR L'INSTITUT NATIONAL DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE

PAR  
LUIS FERNANDO GOMEZ

MODÉLISATIONS DES EFFETS DE SURFACE SUR LES JETS HORIZONTAUX  
SUBSONIQUES D'HYDROGÈNE ET DE MÉTHANE.

Septembre 2010

Université du Québec à Trois-Rivières

Service de la bibliothèque

Avertissement

L'auteur de ce mémoire ou de cette thèse a autorisé l'Université du Québec à Trois-Rivières à diffuser, à des fins non lucratives, une copie de son mémoire ou de sa thèse.

Cette diffusion n'entraîne pas une renonciation de la part de l'auteur à ses droits de propriété intellectuelle, incluant le droit d'auteur, sur ce mémoire ou cette thèse. Notamment, la reproduction ou la publication de la totalité ou d'une partie importante de ce mémoire ou de cette thèse requiert son autorisation.



## Remerciements

J'ai été accueilli en septembre 2007 à l'Institut de recherche sur l'hydrogène (IRH), au sein du département de physique de l'Université du Québec à Trois-Rivières, dans le cadre d'un projet sur la sécurité associée à l'hydrogène, dirigé par le professeur Pierre Bénard. Qu'il trouve ici l'expression de mon respect et de mes remerciements, pour m'avoir accueilli au sein de son équipe et m'avoir permis de réaliser ce travail de recherche et un mémoire au sein de l'IRH dans d'excellentes conditions, tant sur le plan matériel qu'humain. Je le remercie également pour avoir accepté de diriger ce travail et pour le soutien et l'attention apportés tout au long de ces trois années.

J'adresse mes sincères remerciements au professeur Ahmed Hourri, en tant que codirecteur du projet de recherche à l'Institut de recherche sur l'hydrogène. Je lui témoigne ma profonde et sincère reconnaissance pour m'avoir encadré tout au long de ces trois années. Sa disponibilité quotidienne, son suivi attentif, ses réflexions pertinentes et sa rigueur font de lui un encadrant remarquable. Je ne saurais jamais le remercier suffisamment pour les nombreuses heures qu'il a passées à relire et corriger les documents que j'ai produits au cours de ces trois années.

Je n'oublie pas notre informaticien, M. Benjamin Angers, gérant du réseau informatique, pour son aide et son écoute face aux nombreux problèmes survenus.

Que les divers collègues de maîtrise qui m'ont aidé et contribué au travail de ce mémoire, soient également remerciés. Je voudrais remercier tout particulièrement sœur Marie Paule Cossette, pour son appui, sa gentillesse tout au long de ce mémoire.

De plus, j'adresse un grand merci à Paula, mon épouse, pour m'avoir soutenu tout au long de ces deux années, pour tout son temps et sa grande et immense patience et compréhension, ainsi que pour son aide.

Mes dernières pensées vont pour mes amis et ma famille, ceux que je côtoie au quotidien tout comme ceux pour qui la distance n'est qu'un nombre sans grande importance. Qu'ils soient tous remerciés du fond du cœur de la manière la plus chaleureuse, pour leur soutien moral précieux.

## RÉSUMÉ

Le développement des codes et de normes basés sur une méthodologie scientifique requiert la capacité de prédire l'étendue inflammable de déversements gazeux d'hydrogène sous différentes conditions. Des études antérieures ont déjà établi des modèles basés sur les lois de conservation de la mécanique des fluides basées sur des corrélations expérimentales qui permettent de prédire la décroissance de la concentration et de la vitesse d'un gaz le long de l'axe d'un jet libre vertical.

Cette étude s'intéresse aux effets de proximité à une surface horizontale parallèle sur un jet turbulent. Nous nous intéressons à son impact sur l'étendue du champ de la concentration et sur l'enveloppe inflammable en particulier. Cette étude est comparative : l'hydrogène est comparé au méthane. Ceci permet de dégager l'influence des effets de différence de la densité sur le comportement du jet, et de comparer le comportement de l'hydrogène aux corrélations expérimentales, qui ont été essentiellement établies pour le méthane.

Un modèle décrivant l'évolution spatio-temporelle du champ de concentration du gaz dilué est proposé, basé sur la mécanique des fluides computationnelle. Cette approche permet de varier systématiquement les conditions aux frontières (proximité du jet à la surface, par exemple) et de connaître en détail les propriétés de l'écoulement. Le modèle est implémenté dans le code de simulations par volumes finis de FLUENT. Les résultats des simulations sont comparés avec les lois de similitudes découlant de la théorie des jets d'écoulements turbulents libres ainsi qu'avec les résultats expérimentaux disponibles. L'effet de la différence des masses molaires des constituantes du jet et des constituantes du milieu de dispersion est également étudié dans le contexte du comportement d'échelle de la région développée du jet.

# TABLES DES MATIÈRES

|  |      |
|--|------|
| TABLES DES MATIÈRES .....  | v    |
| Liste de figures.....  | ix   |
| Liste de tableaux .....  | xiii |
| Liste des symboles .....   | xvi  |
| Lettres latines .....  | xvi  |
| Sous indices .....   | xvii |
| Lettres grecques .....   | xvii |
| INTRODUCTION .....   | 1    |
| CHAPITRE I : THÉORIE DU JET TURBULENT .....  | 5    |
| 1.1 Propriétés des jets turbulents .....   | 5    |
| 1.1.1 Structure du jet libre turbulent .....   | 5    |
| 1.1.2 Propriétés du jet dans la région principale : relation de similitudes et<br>comportement en lois de puissance.....                     | 7    |
| 1.1.2.1 Comportement d'échelle des profils de vitesse et de concentration.....   | 8    |
| 1.1.2.2 Densités et fractions locales.....   | 10   |
| 1.1.2.3 Détermination du comportement de la vitesse axiale et de la concentration<br>au centre du jet en fonction de la distance axiale..... | 13   |
| 1.1.2.3.1 Conservation de la masse.....  | 13   |
| 1.1.2.3.2 Conservation de la quantité de mouvement .....   | 16   |
| 1.1.3.3.3 Décroissance de la concentration le long de l'axe du jet.....  | 19   |

|   |    |
|---|----|
| 1.1.3.3.4 Transition entre les deux régimes et observation du régime près de l'origine virtuelle .....              | 20 |
| 1.1.3 Prédiction de l'étendue inflammable maximale d'un jet supersonique de combustible dans un milieu oxydant..... | 21 |
| 1.1.3.1 Approche de Birch .....   | 21 |
| 1.1.3.2 Approche de Sandia (Houf, Scheffer et Keller).....  | 23 |
| 1.1.4 Caractérisation du jet à l'aide de paramètre sans dimensions .....  | 24 |
| 1.1.4.1 Le nombre de Reynolds .....   | 24 |
| 1.1.4.2 Le nombre de Froude .....   | 25 |
| 1.1.5 Rôle de la gravité .....  | 25 |
| 1.1.6 Régimes transitoires et stationnaires d'un jet à débit constant.....  | 27 |
| 1.1.7 Effets d'un débit variable .....  | 28 |
| 1.2 Effets de la présence d'une surface sur le développement d'un jet .....   | 29 |
| CHAPITRE II : VALIDATION DU MODÈLE DE TURBULENCE .....  | 33 |
| 2.1 Validation.....   | 33 |
| 2.2 Validation par comparaison avec les travaux de Birch.....   | 34 |
| 2.2.1 Résultats et analyse .....  | 35 |
| 2.3 Validation avec la corrélation de Pitts .....   | 37 |
| 2.3.1 Résultats et analyse .....  | 38 |
| 2.4 Validation avec Schefer <i>et al</i> .....  | 38 |
| 2.4.1 Résultats et analyse .....  | 40 |
| 2.4.1.1 Premier cas: Jet libre vertical, Froude 268.....  | 40 |
| 2.4.1.2 Second cas : Jet libre horizontal, Froude 1000 .....  | 41 |
| 2.5 Validation avec les expériences de Swain <i>et al</i> .....   | 42 |

|   |    |
|---|----|
| 2.5.1 Résultats et analyse .....  | 43 |
| 2.6 Conclusion .....  | 44 |
| CHAPITRE III : JETS DE SURFACE .....  | 45 |
| 3.1 Géométrie utilisée pour les simulations des jets de surface.....  | 46 |
| 3.2 Conditions aux frontières et paramètres de la simulation .....  | 47 |
| 3.2.1 Hypothèses .....  | 48 |
| 3.3 Résultats des simulations .....   | 50 |
| 3.3.1 Profils de concentration .....  | 50 |
| 3.3.2 Étendue inflammable des jets d'hydrogène et de méthane : présentation des résultats .....   | 65 |
| 3.3.3 Analyse de résultats pour l'hydrogène et le méthane .....   | 67 |
| 3.3.4 Effets de la distance au sol sur l'étendue inflammable.....   | 68 |
| 3.3.5 Effet de la présence d'une surface sur le comportement du profil de concentration en fonction de la distance le long de l'axe du jet..... | 70 |
| 3.3.5.1 Effet de la présence des surfaces.....  | 70 |
| 3.3.5.2 Effet de la gravité sur les jets d'hydrogène et de méthane sur le profil de concentration.....  | 77 |
| CHAPITRE IV : CONCLUSIONS.....  | 80 |
| CHAPITRE V : ANNEXES .....  | 82 |
| Annexe A : Gambit .....   | 82 |
| Annexe B : Workbench.....   | 86 |
| Annexe C : FLUENT.....  | 88 |
| C.1 Théorie .....   | 88 |
| C.2. Forces de flottaison .....   | 89 |



|  |    |
|--|----|
| C.3. L'écoulement compressible.....                                    | 89 |
| C.4. Description du modèle de turbulence k- $\epsilon$ réalisable..... | 90 |
| BIBLIOGRAPHIE .....  | 98 |

## Liste de figures

|  |    |
|--|----|
| Figure 1. Représentation générale d'un jet libre turbulent [8]. .....  | 7  |
| Figure 2. Comparaison des profils des champs de concentration et de vitesse axiale d'un jet entrant dans un milieu quiescent à une distance donnée $x$ de l'origine virtuelle du jet, d'après la référence [8]. .....  | 10 |
| Figure 3. Représentation schématique du modèle de Birch pour prédire le diamètre effectif d'un jet sonique issu de l'orifice d'un réservoir dont la pression et la température est maintenue constante. $P$ , $T$ , $V$ et $\rho$ représentent respectivement la pression, la température, la vitesse et la densité. Les indices 1, 2 et 3 réfèrent respectivement aux conditions dans le réservoir, à la sortie de ce dernier et au diamètre effectif. .... | 22 |
| Figure 4. Représentation schématique d'un jet horizontal d'une espèce de masse molaire inférieure à la masse molaire moyenne du milieu ambiant [8]. .....  | 26 |
| Figure 5. Évolution de l'étendue maximale d'un jet en fonction du temps provenant d'un écoulement d'hydrogène de 0.99 kg/sec et de méthane de 2.72 kg/sec d'un orifice circulaire de 8.48 mm de diamètre [10] .....  | 28 |
| Figure 6. Profils de vitesse d'un jet transitoire pour un jet d'hydrogène provenant d'un orifice de 2.7 mm de diamètre à partir d'un réservoir pressurisé à 71 bar. ....   | 28 |
| Figure 7. Écoulement potentiel près d'une plaque immobile. ....  | 29 |
| Figure 8. Représentation schématique d'un jet plan évoluant le long d'une paroi [8]. ....  | 32 |
| Figure 9. La géométrie utilisée pour la validation à partir de Birch avait un axe de symétrie parallèle à la direction de dispersion du jet. Les conditions aux frontières sont indiquées. La taille du domaine était de 2m par 1.5m. ....   | 35 |
| Figure 10. Maillage utilisé pour la validation du modèle de turbulence à partir du modèle de Birch avec un axe de symétrie. ....   | 35 |
| Figure 11. Comparaison des résultats pour le méthane avec le modèle de Birch. ....   | 36 |
| Figure 12. Comparaison des résultats pour le méthane avec le modèle de Pitts. ....   | 38 |

|  |    |
|--|----|
| Figure 13. Volume de contrôle pour la validation à partir du modèle de Houf <i>et al.</i> . Les conditions aux frontières sont indiquées sur la figure. La taille du domaine est de $1.2 \times 0.3 \times 0.3$ m. ....  | 39 |
| Figure 14. Contours de concentration de fraction molaire d'hydrogène pour une fuite horizontale pour un nombre Froude de 1000 en état stationnaire, tels qu'obtenus par Houf <i>et al.</i> . Les distances sont normalisées par le diamètre de l'orifice du jet. Tiré de la référence [9] . ....                                 | 40 |
| Figure 15. L'inverse de la fraction molaire en fonction de la distance normalisée par le diamètre de la fuite.....   | 41 |
| Figure 16. L'inverse de la fraction molaire en fonction de la distance normalisée par le diamètre de la fuite.....   | 42 |
| Figure 17. Comparaison du profil de concentration molaire de l'hydrogène avec l'expérience de Swain <i>et al.</i> . La concentration molaire aux points indiqués sur le graphique est donnée dans le tableau 3. ....   | 43 |
| Figure 18. Représentation schématique de la simulation des jets horizontaux près du sol. ....  | 46 |
| Figure 19. Géométrie et conditions aux frontières pour les jets de surface. ....   | 47 |
| Figure 20. Définitions des étendues axiales et maximales.....  | 65 |
| Figure 21. Étendue relative normalisée (NRE) de jets subsoniques d'hydrogène, pour des nombres de Froude variant entre 50 et 1000, en fonction de la hauteur de l'orifice, normalisée par la hauteur correspondant à un NRE de 0.5. Le diamètre de l'orifice est de 6 mm.....  | 69 |
| Figure 22. Étendue relative normalisée (NRE) de jets subsoniques de méthane, pour des nombres de Froude variant entre 50 et 1000, en fonction de la hauteur de l'orifice, normalisée par la hauteur correspondant à un NRE de 0.5. Le diamètre de l'orifice est de 6 mm.....   | 70 |
| Figure 23. Comparaison entre le comportement de l'inverse de la fraction molaire d'hydrogène en fonction de la distance du jet libre et celui des jets d'hydrogène en présence de surfaces situées à 5, 20 et 50 cm de l'orifice. Le nombre de Froude est de 1000. La distance est normalisée par le diamètre de l'orifice. .... | 71 |

|   |    |
|---|----|
| Figure 24. Concentration de jets d'hydrogène à 0.05m du sol et les jets libres correspondants en fonction de la distance.....   | 72 |
| Figure 25. Concentration de jets d'hydrogène à 0.2m du sol et les jets libres correspondants en fonction de la distance.....  | 73 |
| Figure 26. Concentration de jets d'hydrogène à 0.5m du sol et les jets libres correspondants en fonction de la distance.....  | 73 |
| Figure 27. Comparaison entre les jets de méthane aux différents hauteurs respect du sol, pour Froude 1000 et son respective jet libre, pour l'inverse de la fraction molaire en fonction de la distance normalisé par le diamètre.....  | 74 |
| Figure 28. Concentration de jets de méthane à 0.05m du sol et les jets libres correspondants en fonction de la distance. Les jets de surface à $Fr=750$ (vert) et $Fr=1000$ (jaune) sont superposés sur cette figure. ....  | 75 |
| Figure 29. Concentration de jets de méthane à 0.2m du sol et les jets libres correspondants en fonction de la distance.....   | 76 |
| Figure 30. Concentration de jets de méthane à 0.5m du sol et les jets libres correspondants en fonction de la distance.....   | 76 |
| Figure 31. Comparaison des courbes de l'inverse de la concentration d'hydrogène en fonction de la distance normalisée par le diamètre de l'orifice, pour des jets libres d'hydrogène correspondant à des nombres de Froude variant de 50 à 1000 et pour des jets libres d'hydrogène en l'absence de gravité. ....                                       | 78 |
| Figure 32. Comparaison des courbes de l'inverse de la concentration d'hydrogène en fonction de la distance normalisée, pour des jets libres associés à des nombres de Froude variant de 50 à 1000 et pour des jets libres d'hydrogène en l'absence de gravité. L'orifice du jet est situé à 5 cm du sol.....  | 78 |
| Figure 33. Comparaison des courbes de l'inverse de la concentration d'hydrogène en fonction de la distance normalisée par le diamètre de l'orifice, pour des jets libres d'hydrogène associés à des nombres de Froude variant de 50 à 1000 et pour des jets libres d'hydrogène en l'absence de gravité. L'orifice du jet est situé à 20 cm du sol. .... | 79 |

|   |    |
|---|----|
| Figure 34. Comparaison des courbes de l'inverse de la concentration de méthane en fonction de la distance normalisée par le diamètre de l'orifice, pour des jets libres de méthane associés à des nombres de Froude variant de 50 à 1000 et pour des jets libres de méthane en l'absence de gravité. .... | 79 |
| Figure 35. Interface pour la création d'un volume. ....   | 82 |
| Figure 36. Exemple de géométrie avant de mailler. ....  | 83 |
| Figure 37. Géométrie du domaine du jet avec l'agrandissement de la zone où se trouve l'orifice correspondant à la sortie du gaz. ....   | 84 |
| Figure 38. Exemple d'un maillage en utilisant les fonctions de croissance. ....   | 85 |
| Figure 39. Interface d'entrée de Workbench ....   | 86 |
| Figure 40. Création de la géométrie par Workbench. ....   | 86 |
| Figure 41. Création du maillage par Workbench ....  | 87 |
| Figure 42. Information générale FLUENT ....   | 93 |
| Figure 43. Modèle de turbulence ....  | 93 |
| Figure 44. Sélection et configuration des variables pour les matériaux. ....  | 94 |
| Figure 45. Conditions de frontière pour le débit du gaz. ....   | 94 |
| Figure 46. Conditions de frontière pour « pressure outlet ». ....   | 95 |
| Figure 47. Conditions de frontière pour « wall ». ....  | 95 |
| Figure 48. Configuration des méthodes de solution. ....   | 96 |
| Figure 49. Choix et affichage pendant les calculs des critères de convergence ....  | 96 |
| Figure 50. Courbes de résidus et évolution de l'intégrale du volume de la concentration   | 97 |

## Liste de tableaux

|   |    |
|---|----|
| Tableau 1. Conditions initiales et maillages utilisés pour la validation du modèle de turbulence à partir du modèle de Birch. La température est de 298.15 K. ....  | 35 |
| Tableau 2. Résultats des simulations avec le modèle $\kappa$ - $\varepsilon$ réalisable de l'inverse de la concentration ( $1/\eta$ ) pour plusieurs pressions, comparés aux prédictions de la corrélation de Birch (équation 82). .... | 37 |
| Tableau 3. Comparaison de nos résultats avec les valeurs expérimentales de Swain <i>et al.</i> ....   | 43 |
| Tableau 4. Paramètres de la géométrie pour la modélisation des jets d'hydrogène et de méthane. ....   | 46 |
| Tableau 5. Paramètres de la géométrie pour la modélisation des jets de méthane. ....  | 47 |
| Tableau 6. Propriétés du gaz utilisées dans les simulations de jets de surface discutées dans cette section. ....   | 48 |
| Tableau 7. Conditions entrantes des jets : nombre de Froude, débits, vitesse d'injection à l'orifice ( $U_{\text{sortie}}$ ) et nombre de Reynolds pour l'hydrogène ( $H_2$ ). ....   | 49 |
| Tableau 8. Conditions entrantes des jets : nombre de Froude, débits, vitesse d'injection à l'orifice ( $U_{\text{sortie}}$ ) et nombre de Reynolds pour le méthane ( $CH_4$ ). ....   | 49 |
| Tableau 9. Contours des étendues de concentration critique pour l'hydrogène avec la sortie du gaz localisé à 0.05 m du sol. Les débits associés aux nombres de Froude sont donnés dans le tableau 7. ....                               | 53 |
| Tableau 10. Contours des étendues de concentration critique pour l'hydrogène avec la sortie du gaz localisé à 0.2 m du sol. Les débits associés aux nombres de Froude sont donnés dans le tableau 7. ....                               | 54 |
| Tableau 11. Contours des étendues de concentration critique pour l'hydrogène avec la sortie du gaz localisé à 0.5 m du sol. Les débits associés aux nombres de Froude sont donnés dans le tableau 7. ....                               | 55 |
| Tableau 12. Contours des étendues de concentration critique pour les jets libres d'hydrogène. Les débits associés aux nombres de Froude sont donnés dans le tableau 7. ....   | 56 |

|   |    |
|---|----|
| Tableau 13. Contours des étendues de concentration critique pour les jets libres d'hydrogène à zéro gravité. Les débits indiqués dans la seconde colonne correspondent aux nombres de Froude des tableaux 9 à 12.....   | 57 |
| Tableau 14. Contours des étendues de concentration critique pour les jets d'hydrogène à 0.05 m du sol à zéro gravité. Les débits indiqués dans la seconde colonne correspondent aux nombres de Froude des tableaux 9 à 12.....  | 58 |
| Tableau 15. Contours des étendues de concentration critique pour les jets l'hydrogène à 0.2 m du sol à zéro gravité. Les débits indiqués dans la seconde colonne correspondent aux nombres de Froude des tableaux 9 à 12.....   | 59 |
| Tableau 16. Contours des étendues de concentration critique pour le méthane, avec la sortie du gaz localisé à 0.05 m du sol. Les débits associés aux nombres de Froude sont donnés dans le tableau 8.....   | 60 |
| Tableau 17. Contours des étendues de concentration critique pour le méthane, avec la sortie du gaz localisé à 0.2 m du sol. Les débits associés aux nombres de Froude sont donnés dans le tableau 8. ....   | 61 |
| Tableau 18. Contours des étendues de concentration critique pour le méthane, avec la sortie du gaz localisé à 0.5 m du sol. Les débits associés aux nombres de Froude sont donnés dans le tableau 8. ....   | 62 |
| Tableau 19. Contours des étendues de concentration critique pour les jets libres méthane. Les débits associés aux nombres de Froude sont donnés dans le tableau 8.....  | 63 |
| Tableau 20. Contours des étendues de concentration critique pour les jets libres de méthane à zéro gravité. Les débits indiqués dans la seconde colonne correspondent aux nombres de Froude des tableaux 16 à 19. ....  | 64 |
| Tableau 21. Résultats des simulations pour l'hydrogène. Étendue maximale totale et étendue axiale des jets en fonction de la hauteur et du nombre de Froude. Le jet libre correspond au cas limite d'une hauteur infinie. Les conditions à l'entrée sont données dans le tableau 7..... | 66 |
| Tableau 22. Résultats des simulations pour l'hydrogène en l'absence de gravité : étendue maximale totale et étendue axiale des jets en fonction de la hauteur et du débit. Les  |    |

|  |    |
|--|----|
| débits correspondent à ceux associés aux nombres de Froude spécifiés dans tableau 21.....  | 66 |
| Tableau 23. Résultats des simulations pour le méthane : étendue maximale totale et étendue axiale des jets en fonction de la hauteur et du nombre de Froude. Le jet libre correspond à la limite d'une hauteur infinie. Les propriétés du jet à l'entrée associés au nombre de Froude sont donnés dans le tableau 8..... | 67 |
| Tableau 24. Étendue inflammable d'un jet libre de méthane en fonction du débit en l'absence de gravité ( $g=0 \text{ m/s}^2$ ). Les débits utilisés dans ces simulations correspondent aux nombres de Froude du tableau 23.....  | 67 |



## Liste des symboles

### Lettres latines

$A$  section de l'orifice ( $m^2$ )

$C$  concentration du gaz (% gaz / % vol en air)

$Cd$  de friction à l'orifice réel

$C_1, C_2, C_3$  constantes dans le modèle  $k-\varepsilon$  , constantes de propriétés du jet(sans unités)

$CH_4$  méthane

$d_{ps}$  pseudo-diamètre (m)

$D, d$  diamètre de l'orifice (m)

$D_f$  coefficient de diffusion ( $m^2/s$ )

$E$  taux d'entraînement

$Fr$  nombre de Froude (sans unité)

$g$  accélération de la pesanteur ( $m/s^2$ )

$G$  nombre de Grashof (sans unités)

$H_2$  hydrogène

$k$  constante de décroissance axiale (sans unités)

$p$  relation entre la pression absolue du gaz et la pression ambiante (bar)

$P_g$  pression absolu du gaz (bar)

$P_a$  pression ambiante (bar)

$q$  débit ( $m^3/s$ )

$R$  constant universel des gaz

$Re$  nombre de Reynolds (sans unités)

$t$  temps (s)

$u$  composante longitudinale de la vitesse (m/s)

$v$  composante transversale de la vitesse (m/s)

$w$  poids moléculaire

$X$  Fraction molaire du gaz en question

$Y$  Fraction massique du gaz en question

$x$  distance transversale (m)

$y$  distance transversale (m)

$z$  distance axiale, direction de la dispersion du jet (m)

### **Sous indices**

$a$  conditions ambiantes

$o$  condition à la sortie (origine)

$m$  ligne centrale du jet

### **Lettres grecques**

$\gamma$  ratio de la chaleur spécifique

$\alpha$  constante (sans unité)

$\eta$  décroissance de la concentration molaire moyenne

$\mu$  viscosité dynamique du fluide (Pa/s)

$\nu$  viscosité cinématique (m<sup>2</sup>/s)

$\rho_a$  masse volumique du fluide ambiant (kg/m<sup>3</sup>)

$\rho_g$  masse volumique du gaz (kg/m<sup>3</sup>)

# INTRODUCTION

L'hydrogène est proposé comme carburant de remplacement aux combustibles fossiles, car il est un combustible non polluant qui possède une énergie de combustion gravimétrique environ trois fois supérieure au charbon et au pétrole. Il est également le carburant le plus versatile du point de vue de la diversité des méthodes de production et de son utilisation comme source d'énergie. L'hydrogène peut en effet être produit de façon propre et renouvelable via l'électrolyse de l'eau ou via la biomasse ou de façon non renouvelable via, par exemple le reformage de carburants fossiles. En tant que sous-produit fréquent et non intentionnel de l'industrie des procédés, il peut également être récupéré. On peut convertir l'hydrogène en énergie mécanique par le biais de turbines (efficacité d'environ 50%), de moteurs à combustion interne (efficacité de 25%) et de piles à combustibles (efficacité d'environ 60%). Cependant, en tant que nouveau venu relatif sur le marché énergétique, de nouvelles normes doivent être établies sur une base scientifique. De plus, étant donné l'association controversée de l'hydrogène à l'incident de l'Hindenburg et l'association malheureuse avec la bombe à hydrogène, il est nécessaire d'évaluer les risques associés à son utilisation, afin de les limiter et de rendre la technologie acceptable.

La sécurité de toute installation qui utilise l'hydrogène ou tout autre carburant gazeux peut être envisagée de deux façons : la mitigation des conséquences d'un allumage accidentel, et la prévention directe d'un incident.

La combustion est une réaction chimique qui met en jeu au moins deux espèces chimiques : le comburant (oxydant) et le combustible (réducteur), qui constituent le milieu réactionnel. Dans la plus part des phénomènes de combustion, les systèmes réactionnels sont constitués d'un combustible sous forme solide, liquide ou gazeux ; et d'un comburant gazeux, sous forme d'air ou d'oxygène.

Sur le plan phénoménologique la combustion peut être définie comme étant une réaction chimique exothermique qui peut se maintenir elle-même (réaction en chaîne), et qui ne peut se produire que sous des conditions adéquates de pression, température, et de composition des réactifs. Les processus de transferts de masse et de chaleur déterminent

le mode de combustion. La combustion se produit en deux étapes : l'allumage et la propagation. [14]

L'allumage ne peut se produire que si la concentration de carburant dans le comburant est située à l'intérieure d'une plage bien définie de valeurs. L'allumage requiert ainsi qu'une quantité minimale de carburant soit mélangée au comburant. Si cependant la concentration de carburant est trop élevée, la combustion ne pourra pas être soutenue. Les conditions d'allumage dépendent également de la température et de la pression. En l'absence d'une source d'énergie locale pour enclencher une réaction en chaîne de combustion, il est possible qu'elle s'active thermiquement si la température est au-delà d'une température critique appelée température d'auto-allumage.

La déflagration diffère de la détonation par la façon dont la flamme se propage. Pour une déflagration, l'allumage des régions non-brûlées adjacentes au front de flamme se fait par diffusion thermique, alors que pour une détonation, l'allumage procède par auto-allumage via une onde de choc soutenue par les réactions de combustion.

Une approche à la sécurité basée sur la mitigation repose sur le calcul des propriétés physiques de modes de combustion stationnaires (feux, torchères) et transitoires de l'hydrogène (déflagration, détonation).

Pour les modes de combustions stationnaires, la principale propriété physique d'intérêt, du point de vue de la sécurité, est la radiation thermique émise par la flamme. Pour les modes transitoires, les propriétés physiques d'intérêt aux analyses de sécurité sont la quantité nette d'énergie radiative émise par unité de surface et la surpression. La surpression se produit dans le cas de déflagrations rapides et de détonations. Ces propriétés dépendent des conditions initiales de l'écoulement et de l'environnement dans lequel le mode de combustion évolue (présences d'obstacles pouvant induire de la turbulence, humidité de l'air, conditions de ventilation, etc). Ces propriétés peuvent être calculées par la mécanique des fluides et les méthodes de calcul de transfert de chaleur radiatif. Elles sont ensuite comparées à des seuils de tolérance pour les être humains et les structures, et sont utilisées soit pour définir des distances de séparation entre les sites possibles de fuites ou d'allumage et les zones à protéger, soit pour développer des méthodes de mitigation pour minimiser leur impact.

Nous nous intéresserons, dans ce travail, à la seconde approche, la prévention des risques associés à des carburants gazeux. Cette approche repose sur le design d'installations basé sur la minimisation du risque d'allumage, sous le seuil d'un "risque sociétal acceptable". L'objectif est la prévention que les conditions d'allumage d'un épanchement d'hydrogène soient réunies : (1) on élimine les sources d'allumages (d'énergie) là où le profil de concentration d'un carburant gazeux dans l'air, issu de fuites probables déterminées par une analyse de risque, prédit que la concentration de carburant dans l'air se situe dans la plage d'inflammabilité du carburant et (2) on empêche que le carburant puisse s'accumuler de façon à ce que sa concentration atteigne le seuil inférieur d'inflammabilité, dans les régions à risques pour les être humains et les structures. Dans les deux cas, la mitigation des risques requiert la connaissance de l'évolution du profil de concentration de carburant dans l'air en fonction des conditions de fuite et des conditions environnementales.

Ainsi, le problème de la dispersion de l'hydrogène est au cœur de la problématique de l'utilisation sécuritaire de l'hydrogène, puisqu'il dicte l'évolution du profil de concentration. Les régions délimitées par les limites d'inflammabilité déterminent les zones de risques d'allumage. La grande majorité des fuites se présentent initialement sous la forme de jets. Leur compréhension est donc une étape essentielle à l'élaboration ou à la modification de normes et de codes tenant compte des spécificités de l'hydrogène, qui sont : une vaste plage d'inflammabilité, une vitesse du son élevée (près de quatre fois celle de l'air), une constante de diffusion moléculaire élevée, une masse moléculaire beaucoup plus faible que l'air (et donc un degré de flottaison élevée), une faible énergie d'allumage à la stœchiométrie et une vitesse de combustion élevée. Notons qu'au mieux de notre connaissance, la littérature sur les jets d'hydrogène dans l'air est très limitée et porte principalement sur les jets libres verticaux [4] [11] [17] [20].

En fonction des conditions de stockage (en amont), un jet peut être subsonique ou sonique (on parle également de jet critique). Un jet sera sonique dans une atmosphère à température et pression normales s'il provient d'un réservoir pressurisé à plus de deux atmosphères environ. Un jet sonique se décharge à la vitesse du son. La décharge s'accompagne alors d'une riche structure d'ondes de choc près de l'orifice. Ces structures

sont difficiles à simuler numériquement. Si on s'intéresse aux propriétés à grande échelle et non à la structure détaillée du jet on peut les éviter en utilisant une approche dite de diamètre effectif qui permet de traiter le jet en régime sonique comme s'il était subsonique. Ces approches de diamètre effectif peuvent quand même affecter la structure globale du jet (particulièrement très près des surfaces où l'usage d'un diamètre effectif va modifier l'interaction avec ces dernières). C'est pourquoi dans le cadre de ce mémoire, nous éviterons les problèmes associés à l'usage d'approche de diamètres effectifs en nous limitant au régime subsonique. Les résultats obtenus en régime subsonique dans la région où les mécanismes de dispersion du jet sont dominés par la turbulence (dans la région principale du jet, discutée dans la section suivante), devraient également s'appliquer, au moins qualitativement, à la compréhension des jets soniques. Ceci permettra d'élargir la portée des résultats du présent travail puisque la majorité des jets provenant de fuites sont soniques, les gaz comprimés étant généralement stockés à des pressions supérieures à 2 bars. Nous nous intéresserons particulièrement aux jets horizontaux en présence de surfaces parallèles à la ligne centrale de dispersion.

Le présent mémoire est divisé de la façon suivante. Nous effectuons d'abord un survol de la théorie des jets de gaz, et développerons les principes théoriques de base nécessaires à cette étude. Nous discutons, dans un second temps, de la sélection des modèles pour la simulation des jets implémentés au moyen du logiciel de simulations par volumes finis FLUENT. Le choix du modèle de turbulence est validé avec des résultats expérimentaux. En troisième lieu, nous présentons une étude des effets de proximité sur le champ de concentration d'un jet subsonique horizontal parallèle à la ligne centrale de dispersion. Les simulations numériques sont effectuées à trois différentes distances de l'axe du jet par rapport au sol pour deux sortes de gaz : l'hydrogène et le méthane. Les résultats sont comparés aux propriétés des jets libres avec et sans gravité. Nous concluons dans la dernière partie de ce travail. La théorie et l'utilisation du logiciel de modélisation des fluides FLUENT sont présentées en annexe.

# CHAPITRE I : THÉORIE DU JET TURBULENT

## 1.1 Propriétés des jets turbulents

Un jet peut être défini comme le résultat de l'injection d'un fluide à travers une surface (l'orifice) dans un milieu fluide d'extension infinie (le milieu). Les particules du fluide peuvent être de natures différentes de celles du milieu. L'instabilité provoquée par l'injection des particules du jet conduit à la production de tourbillons pseudo-aléatoires le long de l'axe du jet. Celles-ci provoquent une diffusion des constituantes du jet dans le milieu ambiant et un transfert de quantité de mouvement et de chaleur vers le milieu. Le jet est ainsi caractérisé par une distribution non-uniforme de vitesse, et le cas échéant, de température et de concentration d'espèces. Si le milieu dans lequel le jet se développe est initialement au repos, on parle de jets submergés. Nous ne considérerons, dans cette étude, que des jets isothermes, dont la température est égale à celle du milieu dans lequel ils se développent.

### 1.1.1 Structure du jet libre turbulent

Le jet libre turbulent est divisé en trois régions principales en fonction de la distance (axiale) à la surface d'injection [8] [4] :

- Une région d'induction où la turbulence se développe progressivement, caractérisée par la présence d'un noyau potentiel conique dans lequel la vitesse est constante et égale à la vitesse d'injection du gaz. Le noyau est séparé du milieu par la couche limite, une zone de mélange (figure 1) où le milieu ambiant est entraîné par le fluide injecté.

Les frontières de cette couche forment des surfaces divergentes de symétrie cylindrique dont l'origine est située près de la surface d'injection du jet. La frontière extérieure correspond à la région où les champs des propriétés physiques du jet (vitesse, concentration, température, etc.) diffèrent de leurs valeurs du milieu. La frontière intérieure, quant à elle, est délimitée par le noyau potentiel du

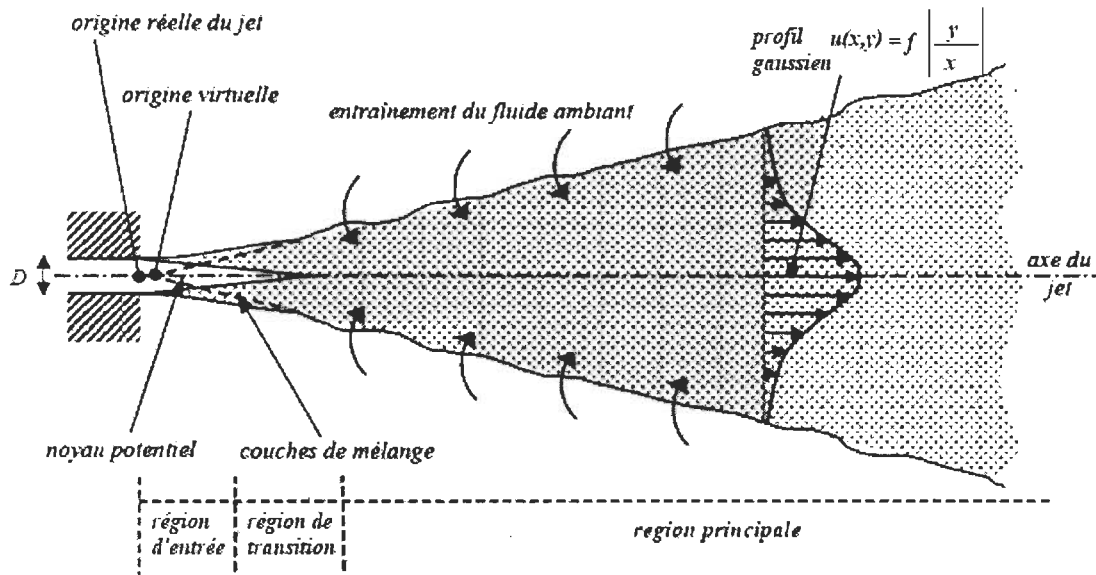
jet, où le champ de vitesse est uniforme et égal à la vitesse de décharge (voir Figure 1 : le noyau potentiel est en blanc et la zone de mélange, en gris).

- Une région de transition séparant le cœur potentiel de la région dominée par la turbulence.
- Une région principale, également appelée "région de panache", de forme conique, où l'évolution des propriétés physiques du jet est complètement dominée par la présence des fluctuations turbulentes. Dans cette région, l'écoulement est bien établi, puisque le jet n'affiche plus de transition entre l'écoulement potentiel et l'écoulement turbulent. La présence d'une seule taille caractéristique associée aux mécanismes régissant l'évolution du jet, mène à un comportement auto-similaire. Les propriétés physiques du jet peuvent alors être décrites par des relations de similitude. La région principale est ainsi également appelée *région de similitude*<sup>1</sup>. Ceci mène, comme il sera démontré plus loin, à un comportement en loi de puissance des profils de vitesse, de concentration et de température en fonction de la distance axiale. Lorsque le fluide du jet est injecté dans le milieu à la même température que ce dernier, la région principale est caractérisée par une température et une pression constantes et égales aux valeurs du milieu [8]. La densité molaire du jet est ainsi constante dans cette région.

---

<sup>1</sup> La région de similitude est une région où toutes les propriétés du fluide sont telles qu'elles peuvent se déduire des profils par amont par similitude. Les solutions peuvent être considérées comme semblables.





**Figure 1.** Représentation générale d'un jet libre turbulent [8].

On distingue [1] [4] [8] l'origine réelle du jet (position de la surface d'injection qui donne naissance au jet) de son origine virtuelle, qui est définie comme le point d'intersection entre le prolongement des frontières extérieures coniques de l'enveloppe du jet dans la région principale et de son axe (figure 1).

### 1.1.2 Propriétés du jet dans la région principale : relation de similitudes et comportement en lois de puissance

Le comportement d'un jet libre est régi par les équations de conservation de la mécanique des fluides. Nous établissons, dans cette section, les lois décrivant la variation des champs de vitesse axiale et de concentration le long de l'axe d'un jet libre. Nous négligerons l'effet de la gravité : le problème aura ainsi une symétrie cylindrique.

À température et pression constantes, les équations intégrales exprimant la conservation de la masse du fluide injecté dans le milieu et la conservation de sa quantité de mouvement peuvent décrire le comportement du jet. On supposera que le jet est constitué d'une espèce chimique (l'hydrogène ou le méthane) différente du milieu ambiant (l'air). En l'absence de réaction chimique, l'air sera traité comme une espèce chimique avec sa propre masse molaire moyenne correspondant à la moyenne pondérée par la composition

de l'air et de l'hydrogène. Dans la démonstration détaillée dans cette section, nous tenons compte du fait que la densité gravimétrique du mélange est non-uniforme, contrairement à la démonstration habituelle, qui suppose une densité gravimétrique constante, ce qui n'est formellement valable que pour les espèces de masse molaire similaire, tel que le méthane et l'air (tel qu'indiqué par Chen et Rodi) [4].

### 1.1.2.1 Comportement d'échelle des profils de vitesse et de concentration

De nombreuses expériences [4] démontrent que le jet détendu affiche des propriétés d'échelles en fonction de son champ de concentration, de son champ de vitesse et même, dans le cas de jets à température différente du milieu, de son champ de vitesse (notons qu'il existe une certaine controverse quant au profil de concentration : certains auteurs prétendent que la fraction de masse est la quantité qui affiche un comportement en fonction d'échelle [1][4]. L'hypothèse d'échelle dicte que la fraction molaire [18] peut s'écrire :

$$c_{H_2}(x, y) = c_m(x)g\left(\frac{y}{L}\right) \quad (1)$$

où la quantité  $c_m(x)$  correspond au maximum, situé au centre du jet le long de l'axe  $x$ , et où  $L$  est une longueur caractéristique associée à la dispersion latérale du jet. La fonction d'échelle  $g\left(\frac{y}{L}\right)$ , quant à elle, vaut donc 1 si  $y=0$  et s'annule à la frontière du jet.

La longueur  $L$  est identifiée à l'échelle de grandeur caractéristique des tourbillons associés à la turbulence. Cette longueur croît avec la distance à l'origine virtuelle, reflétant le fait que les tourbillons augmentent en taille au fur et à mesure que le jet se développe le long de l'axe de sa propagation. On suppose que le jet est complètement dominé par la turbulence et que les processus de diffusion moléculaires sont négligeables devant la diffusion induite par la turbulence.

On pose donc

$$L = \alpha x \quad (2)$$

d'où on tire

$$c_{H_2}(x, y) = c_m(x)g\left(\frac{y}{x}\right) \quad (3)$$

Il est également établi expérimentalement que le profil de vitesse axial obéit à une relation d'échelle similaire

$$u(x, y) = u_m(x)f\left(\frac{y}{x}\right) \quad (4)$$

La fonction d'échelle  $f\left(\frac{y}{L}\right)$  vaut 1 si  $y=0$ . La fonction  $f\left(\frac{y}{L}\right)$  s'annule à la frontière du jet. Les profils de concentration molaire et de vitesse axiale sont généralement considérés comme pseudo-gaussiens (figure 2) :

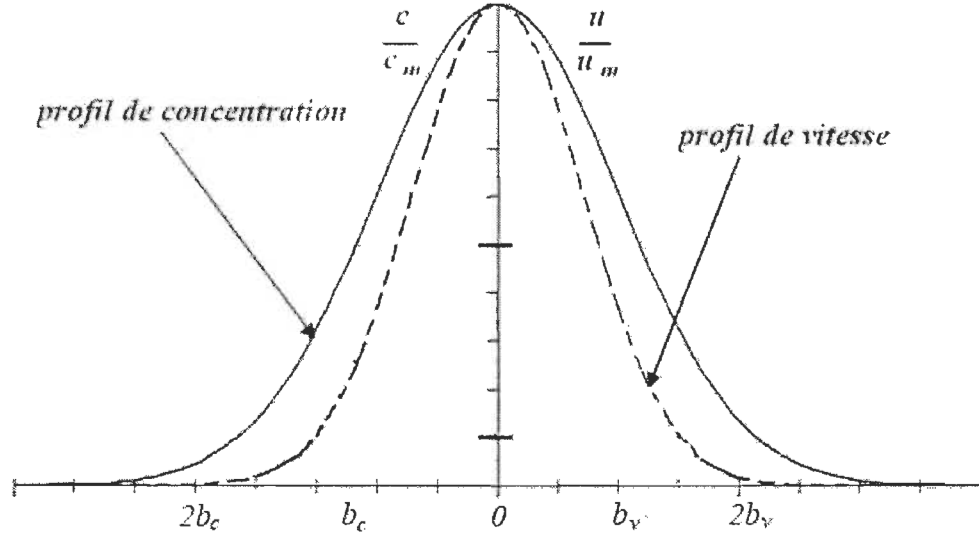
$$\frac{c(x,y)}{c_m(x)} = \exp\left(-(\ln 2)\frac{y^2}{L_c^2}\right) \quad (5)$$

et

$$\frac{u(x,y)}{u_m(x)} = \exp\left(-(\ln 2)\frac{y^2}{L_u^2}\right) \quad (6)$$

On parle de comportement pseudo-gaussien parce que les profils de concentration s'annulent en fait à une distance finie de l'axe du jet : la forme gaussienne des fonctions  $f$  et  $g$  est donc approximative.

On peut définir une demi-largeur de la fraction molaire  $b_c$ , qui correspond à la coordonnée radiale  $y$  pour laquelle la valeur de la fraction molaire vaut la moitié de sa valeur maximale  $u(x)$  [1][15]. La largeur totale du jet est définie comme étant  $2b_c$  [8]. On peut procéder de même pour le profil de vitesse  $u(x,y)$ . La demi-largeur est alors notée  $b_u$  (figure 2).



**Figure 2.** Comparaison des profils des champs de concentration et de vitesse axiale d'un jet entrant dans un milieu quiescent à une distance donnée  $x$  de l'origine virtuelle du jet, d'après la référence [8].

Dans la région principale du jet, les champs de vitesse axiale et de concentration molaire, normalisés par leur valeur maximale (sur l'axe du jet), peuvent ainsi s'exprimer comme une fonction d'échelle en termes de rapport  $\frac{y}{x}$  :

$$\frac{u(x,y)}{u_m(x)} = f\left(\frac{y}{x}\right), \quad \frac{c(x,y)}{c_m(x)} = g\left(\frac{y}{x}\right) \quad (7)$$

Notons que la composante radiale du champ de vitesse des particules du jet (notée  $v(x,y)$ ), qui ne s'établit que par des processus de diffusion, est très faible devant la composante axiale, établie par l'injection du jet. Elle décroît rapidement en fonction de la distance perpendiculaire à l'axe (radiale) et de la distance le long de l'axe du jet (axiale).

### 1.1.2.2 Densités et fractions locales

La fraction massique est définie comme :

$$y_{H_2}(\vec{r}) = \frac{\delta M_{H_2}(\vec{r})}{\delta M_{H_2}(\vec{r}) + \delta M_{Air}(\vec{r})} \quad (8)$$

où  $\delta M_i(\vec{r})$  est la masse de l'espèce  $i$  contenu dans un élément de volume  $\delta V$  centré à  $\vec{r}$ .

Si on divise par l'élément de volume, on trouve que

$$y_{H_2}(\vec{r}) = \frac{\rho_{H_2}(\vec{r})}{\rho_{H_2}(\vec{r}) + \rho_{Air}(\vec{r})} = \frac{\rho_{H_2}(\vec{r})}{\rho_{tot}(\vec{r})} \quad (9)$$

d'où on tire que

$$\rho_{H_2}(\vec{r}) = y_{H_2}(\vec{r})\rho_{tot}(\vec{r}) \quad (10)$$

La densité totale du jet est donnée par

$$\rho_{tot} = \frac{\delta N_{H_2} M_{H_2} + \delta N_{Air} M_{Air}}{\delta V} \quad (11)$$

où  $\delta N_i$  est le nombre de moles de l'espèce  $i$  dans l'élément de volume, et où  $M_i$  est sa masse molaire. Le nombre total de moles est donné par

$$\delta N = \delta N_{H_2} + \delta N_{Air} \quad (12)$$

divisant cette dernière équation par  $\delta N$ , on trouve :

$$1 = c_{H_2} + c_{Air} \quad (13)$$

d'où on tire que :

$$c_{Air} = 1 - c_{H_2} \quad (14)$$

Le symbole  $x_i$  correspond à la fraction molaire de l'espèce  $i$ .

Factorisant  $\delta N$  dans l'équation de la densité gravimétrique, on trouve :

$$\rho_{tot} = \frac{\delta N_{H_2} M_{H_2} + \delta N_{Air} M_{Air}}{\delta V} \quad (15)$$

Si on définit

$$d_{tot} = \frac{\delta N}{\delta V} \quad (16)$$

comme étant la densité molaire totale de particules, on peut écrire :

$$\rho_{tot} = d_{tot}(c_{H_2} M_{H_2} + c_{Air} M_{Air}) \quad (17)$$

$$\rho_{tot} = d_{tot}(c_{H_2} M_{H_2} + (1 - c_{H_2}) M_{Air}) \quad (18)$$

où

$$c_{H_2} = \frac{\delta N_{H_2}}{\delta N} \quad (19)$$

$$c_{Air} = \frac{\delta N_{Air}}{\delta N} = 1 - c_{H_2} \quad (20)$$

La densité locale d'hydrogène est donc donnée par :

$$\rho_{H_2} = d_{tot} c_{H_2} M_{H_2} \quad (21)$$

Notons que la fraction de masse est reliée à la fraction molaire  $x_{H_2}$  par la relation :

$$y_{H_2} = \frac{c_{H_2} M_{H_2}}{c_{H_2} M_{H_2} + c_{Air} M_{Air}} = \frac{c_{H_2} M_{H_2}}{c_{H_2} M_{H_2} + (1 - c_{H_2}) M_{Air}} \quad (22)$$

La fraction molaire, quant à elle, s'exprime ainsi en termes de la fraction de masse :

$$c_{H_2} = \frac{y_{H_2} M_{Air}}{y_{H_2} M_{Air} + (1 - y_{H_2}) M_{H_2}} \quad (23)$$

La densité molaire totale de particules  $d_{tot}$  est régie par l'équation d'état du mélange gazeux (loi de Dalton) et ne dépend donc que de la température du mélange et de la pression totale. Si ces dernières sont constantes, la densité molaire totale sera constante à travers le jet. Ainsi, puisque la densité gravimétrique de l'hydrogène est donnée par

$$\rho_{H_2} = d_{tot} c_{H_2} M_{H_2} \quad (24)$$

La dépendance de  $\rho_{H_2}$  sur la position provient de la fraction molaire  $x_{H_2}$  :

$$\rho_{H_2}(\vec{r}) = d_{tot} M_{H_2} c_{H_2}(\vec{r}) \quad (25)$$

Pour une géométrie cylindrique, ce qui est le cas pour un jet en l'absence de gravité, on peut écrire

$$c_{H_2}(\vec{r}) = c_{H_2}(x, y) \quad (26)$$

où  $x$  correspond à la distance axiale (le long de l'axe du jet) et  $y$  correspond à la distance radiale (perpendiculairement à l'axe du jet). On supposera que l'origine virtuelle du jet est située à  $x=0$ ,  $y=0$ .

### 1.1.2.3 Détermination du comportement de la vitesse axiale et de la concentration au centre du jet en fonction de la distance axiale

Nous dériverons dans cette section les expressions pour le profil de concentration et le profil de vitesse le long de l'axe du jet. La dérivation est présentée de façon détaillée puisqu'elle sera utilisée pour analyser les propriétés des jets d'hydrogène dans l'air sous conditions ambiantes, et qu'une telle démonstration, pour un jet subsonique avec des espèces de masse molaire différentes, est difficile à trouver dans la littérature récente.

La démonstration sera basée sur l'utilisation de la forme intégrale des équations de conservation. L'usage de celle-ci requiert la définition d'un volume de contrôle. Le volume de contrôle correspondra à un cylindre de rayon infini, borné par des coupes transverses dont la normale est parallèle à l'axe du jet. Nous supposons que le jet ne subit pas l'effet de la gravité.

#### 1.1.2.3.1 Conservation de la masse

En l'absence de réaction chimique, la masse d'hydrogène à l'intérieur d'un volume de contrôle doit être conservée. La forme intégrale de la loi de conservation de la masse d'hydrogène s'écrit :

$$\frac{dM_{H_2}}{dt} = - \int_V \vec{J}_{H_2} \cdot d\vec{A} = 0 \quad (27)$$

où  $\vec{J}_{H_2}$  est le flux de matière entrant dans le volume de contrôle  $V$ . L'élément de surface  $d\vec{A}$  est orienté selon la normale à la surface du volume de contrôle.

Le système de coordonnées choisi pour décrire le problème sera cylindrique afin de refléter la symétrie du jet. Le problème est donc bidimensionnel puisque le jet, une fois une moyenne temporelle effectuée sur les fluctuations turbulentes, est invariant sous rotation d'un angle polaire. La coordonnée axiale "x" correspondra dans ce travail à la distance à l'origine virtuelle du jet le long de l'axe de ce dernier. La coordonnée "y" correspondra à la distance radiale à l'axe du jet.

Le courant de matière  $\vec{J}_{H_2}$  est donné par :

$$\vec{J}_{H_2} = \rho_{H_2}(x, y) \vec{v}(x, y) \quad (28)$$

Le volume de contrôle correspond à un cylindre de rayon infini de hauteur  $x - x'$  situé à une distance  $x$  de l'origine virtuelle du jet. Il peut être séparé en trois sections : le bas et le haut du cylindre (notés A1 et A2 respectivement), définis par les plans  $x=x$  et  $x=x'$  respectivement ( $x < x'$ ), et le contour du cylindre (noté A3), défini par  $y=\infty$ . Puisque les composantes axiales et radiales du champ de vitesse s'annulent lorsque le rayon  $y$  tend vers l'infini, la contribution de la surface du cylindre (A3) à la variation de masse est nulle.

Il ne reste donc que la contribution de la surface entrante (A1) et sortante (A2) du jet, dont la normale est parallèle à la composante axiale du champ de vitesse :

$$\vec{J}_{H_2} \cdot d\vec{A} = \rho_{H_2}(x, y) \vec{v}(x, y) \cdot \hat{n} dA \quad (29)$$

Comme

$$\vec{v}(x, y) \cdot \hat{n} = u(x, y) \quad (30)$$

On a

$$\vec{J}_{H_2} \cdot d\vec{A} = \pm \rho_{H_2}(x, y) u(x, y) dA \quad (31)$$

où le signe + correspond à la surface où le champ de vitesse sort du volume de contrôle (où la normale au volume de contrôle est parallèle à  $u(x, y)$ ), et le signe -, à la surface où le flux de matière entre dans le volume de contrôle (où la normale au volume de contrôle est antiparallèle à  $u(x, y)$ ). On peut alors écrire que

$$\frac{dM_{H_2}}{dt} = - \int_S \rho_{H_2}(x, y) u(x, y) dA + \int_S \rho_{H_2}(x', y) u(x', y) dA = 0 \quad (32)$$

d'où

$$\int_S \rho_{H_2}(x, y) u(x, y) dA = \int_S \rho_{H_2}(x', y) u(x', y) dA = C1 \quad (33)$$

Le flux d'hydrogène traversant une section nette du jet est donc conservé le long de l'axe de ce dernier et indépendant de la valeur de  $x$ . La constante C1 correspond à la masse totale d'hydrogène traversant une section nette du jet par unité de temps, et elle est donc égale au débit d'hydrogène  $\dot{q}_{H_2}$  entrant dans le milieu :



$$C1 = \dot{q}_{H_2} = \frac{\pi}{4} M_{H_2} d_{tot} u_0 D^2$$

où D est le diamètre de l'orifice et  $u_0$  est la vitesse à l'orifice du jet.

Pour un l'élément de surface cylindrique, on peut écrire :

$$dA = 2\pi y dy \quad (34)$$

L'intégrale devient alors :

$$\int \rho_{H_2}(x, y) u(x, y) dA = 2\pi \int_0^\infty \rho_{H_2}(x, y) u(x, y) y dy = C1 \quad (35)$$

où C1 est une constante positive égale à  $\dot{m}_{H_2}$ . On peut donc écrire :

$$\int \rho_{H_2}(x, y) u(x, y) dA = 2\pi \int_0^\infty d_{tot} M_{H_2} c_m(x) g\left(\frac{y}{x}\right) u_m(x) f\left(\frac{y}{x}\right) y dy = C1 \quad (36)$$

$$2\pi d_{tot} M_{H_2} c_m(x) u_m(x) x^2 \int_0^\infty g\left(\frac{y}{x}\right) f\left(\frac{y}{x}\right) \frac{y}{x} d\frac{y}{x} = C1 \quad (37)$$

Définissant :

$$C2 = \int_0^\infty g(z) f(z) z dz \quad (38)$$

où C2 est une constante numérique sans dimension dont la valeur est dictée par la forme des fonctions d'échelle.

On a donc :

$$2\pi d_{tot} M_{H_2} c_m(x) u_m(x) x^2 C2 = C1 \quad (39)$$

d'où

$$c_m(x) = \frac{a}{u_m(x) x^2} \quad (40)$$

la quantité "a" étant une constante donnée par

$$a = \frac{C1}{2\pi \cdot C2 \cdot M_{H_2} d_{tot}} = \frac{\dot{q}_{H_2}}{2\pi \cdot C2 \cdot M_{H_2} d_{tot}} = \frac{\frac{\pi}{4} M_{H_2} d_{tot} u_0 D^2}{2\pi \cdot C2 \cdot M_{H_2} d_{tot}} \quad (41)$$

$$a = \frac{u_0 D^2}{8 \cdot C2}$$

Le champ de concentration est couplé au champ de vitesse axiale. Il faut maintenant trouver une expression pour  $u_m(x)$ .

### 1.1.2.3.2 Conservation de la quantité de mouvement

La forme intégrale de la loi de conservation de la quantité de mouvement du solide peut s'écrire :

$$\frac{d\vec{P}_{tot}}{dt} = - \int_V \vec{J}_{\vec{P}_{tot}} \cdot d\vec{A} = 0 \quad (42)$$

où l'intégrale est effectuée sur la surface du volume de contrôle discuté dans la section précédente. Le courant de quantité de mouvement est une dyade de rang 2 donnée par :

$$\vec{J}_{\vec{P}_{tot}} = \rho_{tot}(x, y) \vec{v}(x, y) \vec{v}(x, y) \quad (43)$$

de sorte que le produit  $\vec{J}_{\vec{P}_{tot}} \cdot d\vec{A}$  correspond à un vecteur.

Tel que discuté dans la section précédente,  $\vec{v}(x, y)$  s'annule à l'infini de sorte que le contour A3 du cylindre ne contribue pas à l'intégrale de surface. On a donc :

$$\frac{d\vec{P}_{tot}}{dt} = - \int_S \rho_{tot}(x, y) \vec{v}(x, y) u(x, y) dA + \int_S \rho_{tot}(x', y) \vec{v}(x', y) u(x', y) dA = 0 \quad (44)$$

Si on s'intéresse à la composante axiale du champ de vitesse, on prend le produit scalaire de cette équation avec le vecteur unitaire orienté selon l'axe :

$$\begin{aligned} \frac{d(\hat{n} \cdot \vec{P}_{tot})}{dt} &= \int_S \rho_{tot}(x, y) (\hat{n} \cdot \vec{v}(x, y)) u(x, y) dA \\ &+ \int_S \rho_{tot}(x', y) (\hat{n} \cdot \vec{v}(x', y)) u(x', y) dA = 0 \end{aligned} \quad (45)$$

On a donc :

$$\int_S \rho_{tot}(x, y) (\hat{n} \cdot \vec{v}(x, y)) u(x, y) dA = \int_S \rho_{tot}(x', y) (\hat{n} \cdot \vec{v}(x', y)) u(x', y) dA = C3 \quad (46)$$

où, si on calcul le flux de quantité de mouvement au point d'injection de l'hydrogène

$$C3 = \dot{q}_{H_2} u_0 = \frac{\pi}{4} M_{H_2} d_{tot} u_0^2 D^2 \quad (47)$$

La quantité de mouvement totale le long de l'axe du jet est donc conservée. La constante C3 peut être déterminée à partir des conditions entrantes du jet à la surface d'injection. Telle que définie, la constante C3 est positive. En effet, le champ de vitesse est orienté dans le sens de la normale  $\hat{n}$  à la surface traversée par le flux, qui correspond également à l'orientation de l'axe des y.

Nous avons vu que la densité de masse est :

$$\rho_{tot}(x, y) = d_{tot} \left( c_{H_2}(x, y) M_{H_2} + (1 - c_{H_2}(x, y)) M_{Air} \right) \quad (48)$$

où la densité molaire  $d_{tot}$  ne dépend que de T et de P, qui sont constants dans la région détendue du jet. On a donc

$$d_{tot} \int \left( c_{H_2}(x, y) M_{H_2} + (1 - c_{H_2}(x, y)) M_{Air} \right) u^2(x, y) dA = C3 \quad (49)$$

$$d_{tot} \int \left( c_{H_2}(x, y) (M_{H_2} - M_{Air}) + M_{Air} \right) u^2(x, y) dA = C3 \quad (50)$$

$$M_{Air} d_{tot} \int \left( 1 - \Delta_M c_{H_2}(x, y) \right) u^2(x, y) dA = C3 \quad (51)$$

où  $\Delta_M$  est le paramètre de flottaison (sans unités), défini ainsi :

$$\Delta_M = \frac{M_{Air} - M_{H_2}}{M_{Air}} \quad (52)$$

Si les deux gaz ont une masse molaire similaire (comme c'est le cas pour un jet de méthane dans l'air), le paramètre  $\Delta_M$  sera à toutes fins pratiques nulles.

Notons qu'à notre connaissance, la littérature, principalement écrite pour le gaz naturel, suppose implicitement que le paramètre de flottaison est nul. Cette hypothèse ne tient pas pour l'hydrogène, l'hélium et l'ammoniac aux conditions normales de pression et de température. La présence de  $\Delta_M$  couple l'équation de conservation de la quantité de mouvement à l'équation de conservation de la masse. Substituant pour  $x_{H_2}(x, y)$  et  $u(x, y)$  on obtient :

$$M_{Air} d_{tot} \int \left( 1 - \Delta_M c_m(x) g\left(\frac{y}{x}\right) \right) u_m^2(x) f^2\left(\frac{y}{x}\right) dA = C3 \quad (53)$$

d'où on tire que

$$u_m^2(x) x^2 (C4 - \Delta_M c_m(x) C5) = \frac{C3}{2\pi M_{Air} d_{tot}} \quad (54)$$

avec

$$C4 = \int_0^\infty f^2(z) z dz > 0 \quad (55)$$

et

$$C5 = \int_0^\infty g(z) f^2(z) z dz > 0 \quad (56)$$

Regroupant les termes constants (tout en maintenant le paramètre  $\Delta_M$  explicite dans l'équation), on trouve :

$$u_m^2(x) x^2 (1 - \Delta_M D c_m(x)) = b \quad (57)$$

où D et b sont des constantes positives déterminées par C3, C4 et C5. Le paramètre D est un nombre déterminé par la forme des fonctions d'échelle

$$D = \frac{C5}{C4} > 0 \quad (58)$$

alors que la constante b dépend des conditions initiales et environnementales du jet

$$b = \frac{C3}{2\pi \cdot C4 \cdot M_{Air} d_{tot}} = \frac{\frac{\pi}{4} M_{H2} d_{tot} u_0^2 D^2}{2\pi \cdot C4 \cdot M_{Air} d_{tot}}$$

$$b = \frac{M_{H2} u_0^2 D^2}{M_{Air} \cdot 8 \cdot C4} > 0 \quad (59)$$

Comme nous avons démontré précédemment la relation suivante entre la concentration et le jet

$$c_m(x)(x) = \frac{a}{u_m(x)x^2} \quad (60)$$

On peut écrire

$$u_m^2(x)x^2 \left( 1 - \frac{a\Delta_M D}{u_m(x)x^2} \right) = b \quad (61)$$

$$u_m^2(x)x^2 - aD\Delta_M u_m(x) = b \quad (62)$$

si

$$E = aD = \frac{C5}{2\pi \cdot C2 \cdot C4} \frac{\dot{q}_{H2}}{M_{H2} d_{tot}} \quad (63)$$

On obtient l'équation quadratique suivante pour  $u(x)$

$$u_m^2(x) - \frac{E\Delta_M}{x^2} u_m(x) - \frac{b}{x^2} = 0 \quad (64)$$

Si x tend vers l'infini, et supposant que  $u_m^2(x)$  est une fonction décroissante de x :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} u_m(x) = \frac{\sqrt{b}}{x} \quad (65)$$

Cette solution correspond également à la solution lorsque le paramètre de flottaison est nul et que les deux gaz ont une masse molaire comparable. La solution complète s'obtient en trouvant les zéros de la quadratique :

$$u_m^\pm(x) = \frac{E\Delta_M}{2x^2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(E\Delta_M)^2}{x^4} + \frac{4b}{x^2}} \quad (66)$$

$$u_m^\pm(x) = \frac{E\Delta_M}{2x^2} \pm \frac{1}{2x} \sqrt{\frac{(E\Delta_M)^2}{x^2} + 4b} \quad (67)$$

La racine physique correspond à la racine positive, puisque l'écoulement est entrant (donc  $u(x)$  est positif), et que l'ensemble des constantes sont positives. On a donc :

$$u_m(x) = \frac{E\Delta_M}{2x^2} + \frac{1}{2x} \sqrt{\frac{(E\Delta_M)^2}{x^2} + 4b} \quad (68)$$

Notons que si  $x$  tend vers zéro

$$\lim_{x \rightarrow 0} u_m(x) = \frac{E\Delta_M}{x^2} \quad (69)$$

Le comportement d'un jet d'une composante avec une masse molaire plus petite que celle du milieu ambiant est qualitativement différent de celui d'un jet de flottaison neutre près de l'origine du jet.

#### 1.1.3.3.3 Décroissance de la concentration le long de l'axe du jet

Nous sommes maintenant en mesure de trouver l'expression pour la fraction molaire maximale à une position  $x$  donnée :

$$c_m(x) = \frac{a}{u_m(x)x^2} = \frac{2a}{E\Delta_M + \sqrt{(E\Delta_M)^2 + 4bx^2}} \quad (70)$$

$$c_m(x) = \frac{2a}{E\Delta_M + \sqrt{(E\Delta_M)^2 + 4bx^2}} \quad (71)$$

Si  $x$  tend vers l'infini on retrouve le comportement cité dans la littérature ( $\Delta_M = 0$ ), mais seulement si le facteur de flottaison est négligeable

$$\lim_{x \rightarrow \infty} c_m(x) = \frac{a}{\sqrt{b}} \frac{1}{x} \quad (72)$$

Si  $x$  tend vers zéro (mais que  $\Delta_M \neq 0$ ) on trouve

$$\lim_{x \rightarrow 0} c_m(x) = \frac{a}{E\Delta_M} \quad (73)$$

La concentration n'aura ainsi pas tendance à diverger lorsque  $x$  tend vers zéro pour un fluide de masse molaire différente de celle du milieu ambiant. On vérifie que la constante d'entraînement  $a/\sqrt{b}$  de l'équation (72) est proportionnelle au diamètre de l'orifice et à la racine carrée du rapport de la masse molaire de l'air et de l'hydrogène. En effet, puisque

$a = \frac{u_0 D^2}{8 \cdot C_2}$  et  $b = \frac{M_{H_2} u_0^2 D^2}{M_{Air} \cdot 8 \cdot C_4}$ , on peut écrire :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} c_m(x) = \frac{\frac{u_0 D^2}{8 \cdot C_2}}{\sqrt{\frac{M_{H_2} u_0^2 D^2}{M_{Air} \cdot 8 \cdot C_4}}} \frac{1}{x} \quad ; \quad \lim_{x \rightarrow \infty} c_m(x) = \frac{C_0}{x} \quad (74)$$

si

$$C_0 = \frac{\sqrt{C_4}}{C_2\sqrt{8}} \sqrt{\frac{M_{Air}}{M_{H_2}}} D \quad (75)$$

est la constante de dilution, qui fixe le taux de décroissance de la concentration le long de l'axe. On remarque que cette constante ne dépend pas de la vitesse du jet à l'orifice. Le profil de concentration d'un jet subsonique sera ainsi indépendant, le long de l'axe du débit de la fuite. Ce comportement est à cet égard différent de ce qui est observé dans le régime sonique, où la constante de dilution dépend des conditions à l'orifice.

#### 1.1.3.3.4 Transition entre les deux régimes et observation du régime près de l'origine virtuelle

On peut estimer l'ordre de grandeur de la transition entre les deux régimes à travers les conditions de développement de  $c_m(x)$  dans la limite où  $x$  est grand

$$x \gg \frac{E\Delta_M}{\sqrt{4b}} = \frac{C_5}{2\sqrt{2}C_4 \cdot C_2} \Delta_M \sqrt{\frac{\dot{q}_{H_2} M_{Air}}{M_{H_2}^2 u_0 d_{tot}}} \quad (74)$$

Pour un écoulement subsonique à travers un orifice circulaire on trouve ainsi

$$x \gg \frac{C_5}{2\sqrt{2}C_4 \cdot C_2} \left( \Delta_M \sqrt{\frac{M_{Air}}{M_{H_2}}} \right) d \quad (75)$$

l'ordre de grandeur étant ainsi déterminé par le diamètre de l'orifice.

En pratique, on doit donc s'attendre à ce que le régime des faibles distances axiales soit difficile à observer, même pour l'hydrogène, puisque sa taille est déterminée par les dimensions de l'orifice. Si l'origine virtuelle est située dans la zone d'induction ou de transition, il est probable que le seuil séparant les comportements faibles  $x$  et  $x$  élevés se situe également dans ces régions du jet, qui sont régies par la présence ou la proximité du cœur potentiel de l'écoulement. Rappelons que nous ignorons l'effet sur le jet du cœur potentiel dans l'analyse présentée dans les sections précédentes, puisque l'écoulement est supposé complètement turbulent. Ceci rend l'observation du régime à faible  $x$  improbable ou difficile.

Tel que noté par Chen et Rodi [4], la croissance linéaire de l'inverse de la concentration en fonction de la distance est une approximation lorsque les densités du fluide constituant le jet est différente de celle du milieu dans lequel il évolue.

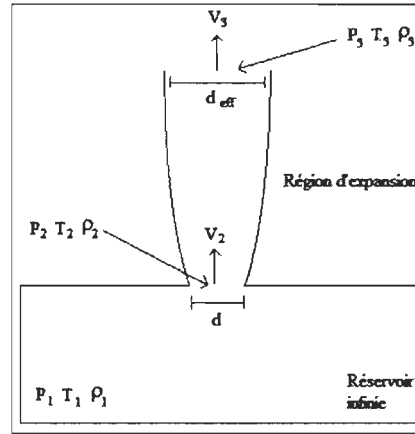
### 1.1.3 Prédiction de l'étendue inflammable maximale d'un jet supersonique de combustible dans un milieu oxydant

#### 1.1.3.1 Approche de Birch

Birch *et al* [2] [3] ont développé un modèle théorique qui prédit l'étendue des champs de concentration pour le gaz naturel lors d'une fuite en régime stationnaire, avec débit, pression et température constante pour jets verticaux. Les auteurs ont validé leur approche par des mesures expérimentales effectuées sur des jets soniques (vitesse du gaz à la sortie du réservoir égale à la vitesse du son) verticaux de gaz naturel dans l'air pour des pressions allant de 2 à 70 bars.

Dans leur approche, Birch *et al* [2] [3] ont défini un pseudo-diamètre ou diamètre effectif localisé en aval du diamètre réel de l'orifice du jet, qui permet de décrire le comportement d'un jet sonique par un jet en régime subsonique équivalent. Ces auteurs ont établi une relation semi-empirique, validée expérimentalement, qui permet de calculer les valeurs de la concentration en fonction de la distance en aval sur l'axe central du jet (c'est-à-dire la distance axiale), tout en évitant la modélisation de la structure complexe d'ondes de chocs d'un jet sonique près de l'orifice réel. Ceci facilite la solution des équations de conservation de la masse et de l'énergie. L'approche de Birch est présentée dans la figure 3. Le modèle est composé de trois étapes (ou étages) : la première correspond aux conditions internes du réservoir; la seconde, aux conditions à l'orifice et la troisième, aux conditions ambiantes après l'expansion.

Dans la figure 3,  $d$  est le diamètre à la sortie du réservoir,  $V_2$  est la vitesse à la sortie de l'orifice,  $V_3$  la vitesse au diamètre effectif;  $\rho_1$ ,  $P_1$ ,  $T_1$  sont respectivement la densité, la pression et la température à l'intérieur du réservoir,  $\rho_2$ ,  $P_2$ ,  $T_2$  sont la densité, la température, et la pression à la sortie du réservoir,  $\rho_3$ ,  $P_3$ ,  $T_3$  sont la densité, la pression et la température après la zone d'expansion, au point 3, évalués aux conditions du milieu ambiant dans lequel le jet se développe.



**Figure 3.** Représentation schématique du modèle de Birch pour prédire le diamètre effectif d'un jet sonique issu de l'orifice d'un réservoir dont la pression et la température est maintenue constant.  $P$ ,  $T$ ,  $V$  et  $\rho$  représentent respectivement la pression, la température, la vitesse et la densité. Les indices 1, 2 et 3 réfèrent respectivement aux conditions dans le réservoir, à la sortie de ce dernier et au diamètre effectif.

En calculant les valeurs du débit pour les points 2 et 3 par l'équation de conservation de masse et de quantité de mouvement, Birch a obtenu le résultat suivant pour le pseudo-diamètre

$$d_{ps} = d \sqrt{C_d \frac{v_2 \rho_2}{v_3 \rho_3}} \quad (76)$$

où  $d_p$  est le pseudo-diamètre,  $d$  est le diamètre réel et  $C_d$  est le coefficient de friction à l'orifice réel (ce facteur corrige l'approximation faite lorsqu'on considère que le jet sort de l'orifice à vitesse constante partout le long de la surface de ce dernier).

Les valeurs de la pression, la densité, la température et la vitesse à la sortie sont calculées à l'aide des relations isentropiques et de la loi de gaz parfaits :

$$P_2 = P_1 \left( \frac{2}{\gamma+1} \right)^{\gamma/(\gamma-1)} \quad (77)$$

$$T_2 = T_1 \left( \frac{2}{\gamma+1} \right) \quad (78)$$

$$\rho_2 = \frac{w P_1}{R T_1} \left( \frac{2}{\gamma+1} \right)^{1/(\gamma-1)} \quad (79)$$

$$V_2 = V_1 \left( \sqrt{\frac{R T_1}{w} \left( \frac{2}{\gamma+1} \right)} \right) \quad (80)$$



où  $\gamma$  est le rapport des chaleurs spécifiques,  $w$  le poids moléculaire du gaz en question et  $R$  la constante universelle des gaz. Les relations (23) correspondent aux propriétés du jet au point 2. En utilisant les relations isentropiques, on est capable de déduire l'expression générale pour le pseudo-diamètre.

$$\frac{d_{ps}}{d} = C_D \left( \frac{P_1}{P_2} \right) \left( \frac{2}{\gamma+1} \right) \quad (81)$$

La relation générale pseudo-empirique en fonction du pseudo-diamètre, qui permet d'estimer la décroissance de la concentration le long de la ligne centrale du jet, pour le jet rond libre turbulent, est donnée par :

$$\eta = \frac{k d_{ps}}{x+a} \left( \frac{\rho_a}{\rho_g} \right)^{1/2} \quad (82)$$

où  $k$  représente la constante de décroissance axiale et est déterminée expérimentalement. La valeur utilisée par Birch *et al* est de 4.9 pour le gaz naturel. Le pseudo-diamètre,  $d_{ps}$  calculé à partir de l'équation 5, la variable  $x$  représente une position le long de l'axe central du jet, la constante  $a$  correspond à la position de l'origine virtuelle du jet par rapport au pseudo-diamètre. Ce paramètre est en général négligeable. La densité  $\rho_a$  est celle du fluide ambiant évalué aux conditions ambiantes, et  $\rho_g$  correspond à la densité du gaz aux conditions ambiantes.

#### 1.1.3.2 Approche de Sandia (Houf, Scheffer et Keller)

Houf *et al* ont réutilisé la méthode de Birch afin de déterminer la décroissance du profil de concentration pour les jets libres d'hydrogène. Dans son implémentation, Houf *et al* ont reformulé le diamètre effectif en remplaçant la vitesse à la fin de la région d'expansion par une vitesse effective, suggéré initialement par Hess *et al* pour les jets gazeux dans la région principale du jet.

Le diamètre effectif de la source s'obtient de l'équation suivante :

$$d_{eff} = \left( \frac{\rho_j u_j}{\rho_{gaz} u_{eff}} \right)^{1/2} d_j \quad (83)$$

où  $\rho_j$  et  $u_j$  sont respectivement la densité et la vitesse à la sortie du jet,  $\rho_{gaz}$  est la densité du gaz constituant le jet à pression et température ambiante,  $d_j$  est le diamètre de l'orifice,

and  $u_{eff}$  est la vitesse à la fin de la zone d'expansion. Cette dernière est donnée par l'expression suivante :

$$u_{eff} = u_j + (p_j - p_\infty)/(\rho_j u_j) \quad (84)$$

où  $p_j$  est la pression à la sortie et  $p_\infty$  est la pression ambiante. Les deux équations précédentes peuvent être utilisées pour calculer le diamètre effectif pour des jets supercritiques, et ils sont valides autant pour les gaz idéaux que pour les gaz réels.

Les propriétés du jet dans la région principale, régie par la turbulence, sont identiques à celles d'un jet subsonique dans la région correspondante, du moment qu'on remplace le diamètre par le diamètre effectif du jet.

#### 1.1.4 Caractérisation du jet à l'aide de paramètre sans dimensions

##### 1.1.4.1 Le nombre de Reynolds

Le nombre de Reynolds représente le rapport entre l'inertie du jet et les forces visqueuses et mesure l'importance relative de ces effets pour un écoulement. Il est défini par les propriétés du jet à l'orifice qui donne naissance au jet [1] [8] :

$$Re = \frac{u_0 d}{\nu} \quad (85)$$

Dans cette expression,  $d$  est le diamètre de l'orifice où le gaz est injecté,  $u_0$  la composante de vitesse axiale (ou longitudinale) à l'orifice et  $\nu$  la viscosité cinématique du gaz injecté. Le nombre de Reynolds détermine l'origine virtuelle du jet (plus le nombre de Reynolds est élevé et plus l'origine virtuelle s'éloigne de l'orifice) ainsi que la taille des différentes régions du jet.

Nous nous limiterons à l'étude de jets avec un nombre de Reynolds supérieur à 2000 [8]. Pour de tels jets, les phénomènes de diffusion moléculaire sont négligeables par rapport aux processus de diffusions provoqués par les tourbillons turbulents. Le comportement du jet est alors indépendant des viscosités moléculaires du fluide ambiant et du fluide injecté.

### 1.1.4.2 Le nombre de Froude

Les forces de flottaisons sont présentes dans un jet s'il y a une différence entre la densité du gaz constituant et celle du milieu au repos. Le nombre de Froude permet de déterminer qualitativement quand le comportement d'un jet est régi par la quantité de mouvement ou par les forces de flottaison; il représente le rapport entre les forces d'inertie et les forces de flottaison. Nous utiliserons la définition suivante du nombre de Froude :

$$Fr = \frac{u_0^2}{g \frac{(\rho_a - \rho_{sortie})}{\rho_{sortie}} d} \quad (86)$$

où  $u_0$  est la vitesse du jet à l'orifice,  $g$  est l'accélération de la gravité,  $d$  est le diamètre de l'orifice d'où provient le jet,  $\rho_a$  est la densité ambiante du milieu et  $\rho_{sortie}$  est la densité du gaz injecté à l'orifice de la fuite. Cette définition met en évidence le rôle des forces de bouées par rapport à l'inertie du système. La racine carrée de cette expression correspond au nombre de Froude densimétrique

$$Fr_d = \frac{u_0}{\sqrt{g \frac{(\rho_a - \rho_{sortie})}{\rho_{sortie}} d}} \quad (87)$$

Le nombre de Froude est relié au nombre de Reynolds, discuté ci-haut, via le nombre de Grashof, dont l'expression est donnée par :

$$G = \frac{g(\rho_a - \rho_{sortie})}{\rho_{sortie}} \quad (88)$$

via l'expression suivante (Paranjpe [13]) :

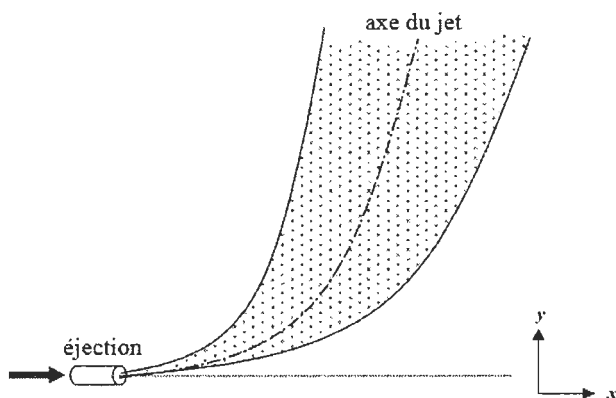
$$Fr = \frac{Re^2}{G} \quad (89)$$

Le nombre de Grashof estime l'importance relative des forces de bouée et de friction.

### 1.1.5 Rôle de la gravité

Nous n'avons pas tenu compte, jusqu'à présent, des effets liés à la gravité, même si nous avons considéré des jets dont la masse molaire des constituantes pouvait être différente de celles du milieu. Tant qu'il n'existe pas de différence appréciable entre les masses molaires, les jets libres stationnaires horizontaux se comportent, en présence de la gravité,

comme les jets verticaux. Si les constituantes du jet horizontal sont plus légères ou plus lourdes que le milieu ambiant, sa trajectoire va s'incliner vers le haut ou le bas, selon que la masse molaire des constituantes du jet est plus basse ou plus élevée que celles des molécules constituant le milieu [8][15].



**Figure 4.** Représentation schématique d'un jet horizontal d'une espèce de masse molaire inférieure à la masse molaire moyenne du milieu ambiant [8].

La plupart des études effectuées sur le profil de concentration d'une espèce injectée par jet dans un milieu portent sur des gaz de masses molaires comparables, comme par exemple des jets de méthane dans l'air.

Récemment, des études ont été faites sur des jets libres horizontaux d'hydrogène dans l'air par le groupe de Sandia [17] [9]. Les jets horizontaux subsoniques peuvent être classés en fonction de leur nombre de Froude, qui permet de qualifier l'importance relative des forces de flottaison et de l'inertie. Une discussion des jets horizontaux soniques en termes du nombre de Froude est compliquée par le fait que la densité de l'hydrogène au point d'injection peut être plus grande que la densité de l'air, ce qui signifie que le nombre de Froude tel que discuté dans la section précédente peut diverger (voir les équations 86 et 87). La définition du nombre de Froude doit alors être revisitée et calculée à partir d'un diamètre effectif.

Le comportement des jets dont le nombre de Froude est supérieur à 1000 est régi par l'inertie (c'est-à-dire sa quantité de mouvement, on parle de "*momentum-driven*" en anglais). Le comportement des jets dont le nombre de Froude est inférieur à 10 est

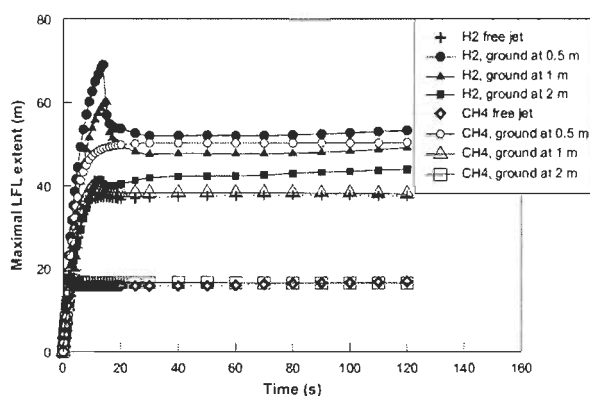
déterminé par la flottaison. Les jets dont le nombre de Froude est intermédiaire (entre 10 et 1000) sont transitoires et influencés par les deux effets [17].

À faible débit, les forces de flottaison peuvent affecter la trajectoire des particules de jet dont le nombre de Froude est faible. Une courbure significative de l'axe du jet peut alors se manifester (figure 4), ce qui peut changer le profil de décroissance de la concentration le long de l'axe (puisque le taux d'entraînement de l'air peut également être affecté), et ainsi son étendue inflammable par rapport au jet libre sans gravité. Notons que nous définissons l'*étendue inflammable* comme étant la distance moyenne, mesurée à partir de l'origine du jet, où la limite inférieure d'inflammabilité du jet d'un combustible dans un milieu oxydant est atteinte.

Les données expérimentales du groupe de Sandia indiquent sans surprise que le développement initial du jet est dominé par sa quantité de mouvement [19]. Le nombre de Froude local est élevé et les forces de flottaison sont suffisamment petites pour être considérées comme négligeables en comparaison avec l'inertie du jet. Les propriétés du jet issues du comportement auto-similaire discuté dans les sections précédentes peuvent alors être observées. Au fur et à mesure que le jet se développe, les forces de flottaison deviennent importantes et le nombre de Froude décroît localement (le diamètre du jet augmente et la vitesse des particules diminue). Les forces de flottaison commencent alors à contribuer significativement au développement du jet [17].

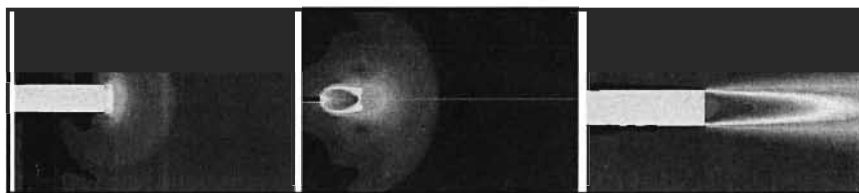
#### **1.1.6 Régimes transitoires et stationnaires d'un jet à débit constant**

Le régime transitoire d'un jet correspond à la période pendant lequel ses propriétés dépendent explicitement de la fonction du temps, même si on effectue une moyenne d'ensemble. Il se termine au moment où le jet atteint l'état d'équilibre, qui correspond au régime stationnaire, où les propriétés moyennes ne changent plus en fonction du temps (voir figure 5). La durée du régime transitoire correspond à l'échelle de temps requise pour l'atteinte de l'équilibre.



**Figure 5.** Évolution de l'étendue maximale d'un jet en fonction du temps provenant d'un écoulement d'hydrogène de 0.99 kg/sec et de méthane de 2.72 kg/sec d'un orifice circulaire de 8.48 mm de diamètre [10].

Le régime transitoire est marqué par la propagation d'un front entouré d'une zone de recirculation qui se développe jusqu'à ce que la structure de l'état stationnaire, discutée au début du chapitre, s'établisse, tel qu'illustré dans la figure 6 ci-dessous.



**Figure 6.** Profils de vitesse d'un jet transitoire pour un jet d'hydrogène provenant d'un orifice de 2.7 mm de diamètre à partir d'un réservoir pressurisé à 71 bars.

La durée du régime transitoire varie selon les conditions initiales du jet et les conditions aux frontières. Typiquement, elle est de l'ordre de 20-30 secondes pour les jets qui seront considérés dans la présente étude. L'analyse des propriétés à l'équilibre du jet, qui est l'objet de ce travail, ne peut se faire qu'après l'établissement de l'équilibre.

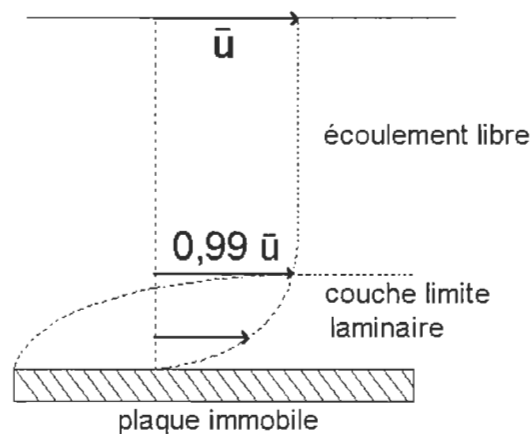
### 1.1.7 Effets d'un débit variable

Les jets libres à débit variable se produisent lorsqu'un réservoir fini se vide dans le milieu ambiant. Ils sont caractérisés par un débit qui diminue en fonction du temps, et affichent un comportement différent des jets à masse volumique constante, que nous avons étudiés jusqu'à présent. Le flux de matière et de quantité de mouvement traversant la surface

d'entrée d'un volume de contrôle et la surface de sortie peut être différent, ce qui implique que les relations que nous avons démontrées dans les sections précédentes ne s'appliquent qu'au mieux approximativement. De plus, au fur et à mesure que l'inertie du jet diminue, les effets de gravité prennent de l'importance [15].

## 1.2 Effets de la présence d'une surface sur le développement d'un jet

Les composantes parallèles et perpendiculaires du champ de vitesse d'un fluide visqueux à un objet s'annulent à la surface de ce dernier. L'analyse de Prandtl (1904) démontre que l'écoulement près de l'objet peut être divisé en deux régions : une couche limite, située près de l'objet, régie par les forces de friction entre la surface et le fluide, et une région éloignée où ces effets sont négligeables, et généralement décrite en termes d'un écoulement potentiel, modifié par la forme de l'objet. Il n'y a pas de limites précises entre la région du fluide où ce dernier peut être considéré comme potentiel et la couche limite. On définit la frontière traditionnellement par le point où la vitesse du fluide au dessus d'une surface atteint 99 % de sa valeur dans le jet libre potentiel (figure 7).



**Figure 7.** Écoulement potentiel près d'une plaque immobile.

On classe généralement les écoulements en présence de surfaces en deux catégories : les écoulements externes, qui se produisent autour d'objets solides, et les écoulements internes, qui se produisent à l'intérieur d'objets tels que des tuyaux et des canaux. L'effet de la surface se traduit par l'apparition de forces de friction pour un fluide visqueux. Si les équations différentielles qui les décrivent sont identiques, les conditions aux frontières

sont différentes, et le comportement des écoulements est qualitativement différent. La couche limite des écoulements externes n'a pas de solution analytique en général. La présence de gradients de pression orientés contre l'écoulement peut modifier le champ de vitesse de façon importante puisqu'il peut alors s'inverser à une certaine hauteur de la surface. Ce phénomène de séparation du jet se produit lorsque la composante normale à la surface (parallèle au vecteur unitaire  $\hat{n}$ ) du gradient de la composante du champ de vitesse parallèle à la surface (notée  $u$ ) s'annule ( $\hat{n} \cdot \nabla u = 0$ ).

La largeur de la couche limite ( $\delta(x)$ ) croît le long de surface à partir du point de stagnation, qui est l'endroit où le fluide entre en contact avec le bord d'attaque de la surface. Dans le cas d'un écoulement non turbulent, l'épaisseur de la couche limite est décrite par l'équation de Blasius, qui est conforme à l'analyse de Prandtl, affichant une croissance essentiellement linéaire avec la distance (le long de la surface) de  $x$  jusqu'à saturation à la valeur prédite par l'écoulement potentiel à une hauteur correspondant à la largeur de la couche limite.

Cette analyse est valable pour des nombres de Reynolds faibles, lorsque les écoulements sont laminaires et potentiels loin de la surface. Dans le contexte des jets, un comportement de type Blasius peut se produire près de l'origine réelle du jet, dans la région d'induction du jet où le noyau potentiel subsiste.

En fonction d'un nombre de Reynolds croissant, l'écoulement passe par une zone de transition pour éventuellement devenir turbulent. Les forces de friction dans un écoulement turbulent sont alors provoquées par les fluctuations turbulentes, qui dominent largement les forces de friction dues à la viscosité du fluide, induites par la proximité d'une surface. Le profil du champ de vitesse peut alors être décrit par une relation de similarité qui a été établie par de nombreuses études expérimentales, appelée *loi du mur*, qui dicte que le profil de vitesse dépend de façon logarithmique sur la distance au mur. Cette approche, largement utilisée dans la littérature, sera employée dans la présente étude pour décrire l'effet de la présence de la surface. Les équations régissant le profil du mur près de la paroi sont :

$$U^* = \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^*) \quad (90)$$



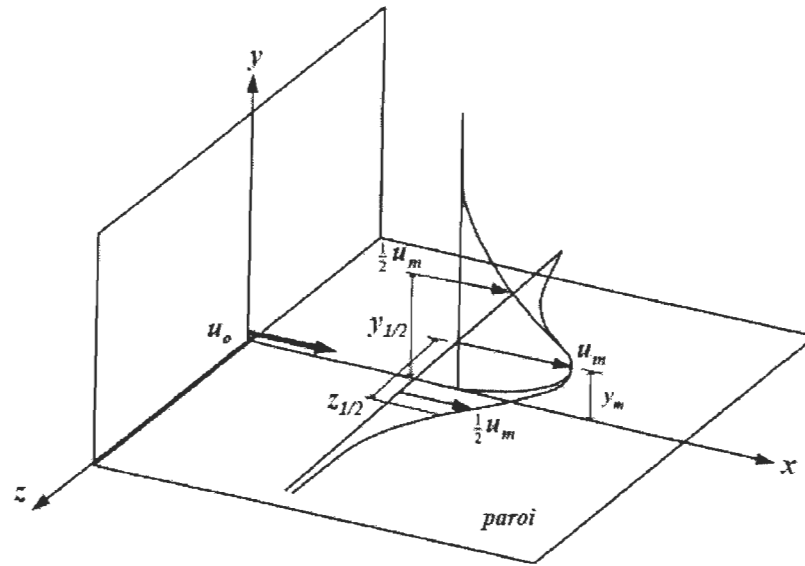
$$y^* \equiv \frac{\rho C_\mu^{1/4} k_P^{1/4} y_P}{\mu} \quad (91)$$

où  $\kappa$  est la constante de Von Karman ( $= 0.42$ ),  $E$  est une constante empirique ( $= 9.81$ ),  $\rho$  est la densité du fluide,  $C_\mu$  est une constante empirique ( $= 0.09$ ),  $k$  l'énergie cinétique turbulent au point  $P$ ,  $y_P$  la distance du point  $P$  au mur,  $\mu$  la viscosité dynamique du fluide.

La loi du mur est facile à utiliser du moment qu'on puisse calculer les forces de cisaillement à la surface. Elle aura un impact sur le profil de concentration, puisqu'elle affecte les propriétés de dispersion du fluide par l'entremise de son impact sur le champ de vitesse.

L'étude des effets de proximité sur un jet est différente de l'étude des effets de proximité d'un écoulement externe à une surface. Dans ce dernier cas, l'écoulement loin de la surface, a une valeur fixe de la vitesse (déterminée par l'écoulement potentiel), qui est indépendante de la distance au mur. Pour le jet par contre, le profil de vitesse affiche une valeur maximale le long de son axe et s'annule loin de ce dernier. Le profil de vitesse dépend également de la distance à l'origine du jet le long de l'axe de ce dernier, tel que discuté précédemment.

Pour illustrer les différences entre les deux cas, il suffit de considérer un jet émit le long d'une paroi. Le jet se décolle progressivement, tel qu'illustré sur la figure 8 [15]. La vitesse maximale du jet, notée  $u_m$ , se produit à une hauteur  $y_m$  de la paroi, appelée *hauteur de décollement* ou *décollement*. La valeur de la vitesse maximale est déterminée par le débit du jet, et de la distance à l'origine.



**Figure 8.** Représentation schématique d'un jet plan évoluant le long d'une paroi [8].

La loi du mur, telle qu'implémentée dans FLUENT, sera utilisée pour modéliser l'influence de la paroi sur l'évolution du jet. L'étude présentée dans ce mémoire sera donc valable en autant que la loi du mur s'applique.

## CHAPITRE II : VALIDATION DU MODÈLE DE TURBULENCE

### 2.1 Validation

Les propriétés des jets subsoniques turbulents ont été abondamment étudiées expérimentalement, numériquement et analytiquement. L'évolution du profil de concentration d'un jet d'un fluide dans un milieu ambiant constitué d'un autre fluide en présence de surfaces n'a par contre, pratiquement pas été analysée jusqu'à présent. Étant donné que ces études peuvent atteindre un niveau de complexité assez considérable, l'utilisation d'outils de modélisation numérique comme la mécanique des fluides computationnelle (CFD) basés sur la méthode des volumes finis ou des éléments finis est indispensable afin d'aider à les résoudre d'une manière rapide et précise, en effectuant un minimum d'hypothèses simplificatrices. Une des étapes les plus importantes dans l'établissement d'un modèle d'écoulement de fluides pour une approche CFD est la sélection d'une approche adéquate à la modélisation de la turbulence, adapté aux conditions des cas à étudier, afin d'obtenir des résultats précis en optimisant les ressources informatiques. À cette fin, plusieurs simulations numériques ont été réalisées afin de valider le modèle de turbulence utilisé dans ce travail. Les résultats des expériences numériques ont été analysés et comparés avec les résultats expérimentaux et numériques d'auteurs tels que Birch *et al* [2], Pitts [11], Schefer *et al* [17], Houf *et al.*[9] et Swain [20].

Les simulations effectuées dans ce travail sont basées sur la méthode des volumes finis en utilisant le logiciel commercial FLUENT (versions 6.3 et 12.1). Les logiciels Gambit et « Workbench » ont été employés pour la création de la géométrie et du maillage.

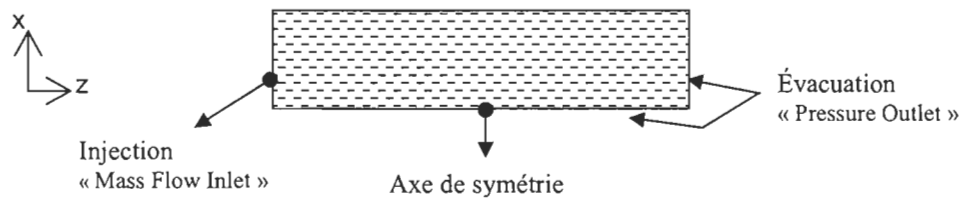
Parmi les dix différents modèles de turbulence disponibles dans FLUENT, les modèles appartenant à la famille des approches " $k-\epsilon$ " ont été choisis, et plus spécifiquement les sous-modèles "RNG" et "réalisable". Le premier permet d'étendre la plage de validité de l'approche k-epsilon habituelle à des nombres de Reynolds faibles, et le second est plus

apte à décrire le comportement de la dispersion du champ de concentration et de vitesse pour les jets ronds supersoniques et subsoniques libres et en présence de surfaces. L'approche "réalisable" est mieux adaptée à l'analyse d'écoulements en rotation, des couches limites soumis à de forts gradients de pression, des phénomènes de séparation et de recirculation (pour plus amples informations voir les annexes à la fin du mémoire). Ces deux approches, basées sur une moyenne de Favre des équations de Navier-Stokes, plutôt que sur le filtrage des petits tourbillons, permettent d'effectuer des simulations rapidement par rapport à des approches plus détaillées comme l'approche LES (Large Eddy Simulations).

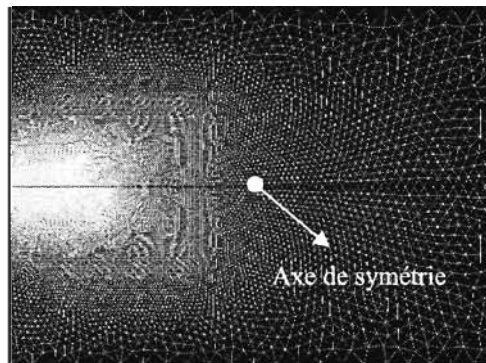
## **2.2 Validation par comparaison avec les travaux de Birch**

Des simulations ont été effectuées pour l'étude de la dispersion de jets libres verticaux de gaz naturel provenant d'un réservoir ayant les pressions suivantes: 3.5, 36 et 71 bars. Le diamètre de l'orifice est de 2.7 mm. Nous avons exploité l'existence d'un axe de symétrie cylindrique (l'axe du jet) afin de minimiser le temps de calcul (figure 9). La taille du domaine était de 2 m par 1.5 m. Le maillage (non structuré), constitué de 94136 éléments triangulaires, a été réalisé avec Gambit (figure 10). Les résultats obtenus en exploitant la symétrie cylindrique du problème concordaient avec une simulation étalon tridimensionnelle.

La pression de stockage a été déduite de l'approche de Birch avec une température de stockage de 298.15°K pour obtenir le débit du gaz correspondant aux expériences de Birch [2] (voir le tableau 1). Les propriétés thermodynamiques du méthane furent utilisées pour tous les calculs, le gaz naturel utilisé par Birch dans ses expériences étant composé à 96 % de méthane (par volume).



**Figure 9.** La géométrie utilisée pour la validation à partir de Birch avait un axe de symétrie parallèle à la direction de dispersion du jet. Les conditions aux frontières<sup>2</sup> sont indiquées. La taille du domaine était de 2m par 1.5m.



**Figure 10.** Maillage utilisé pour la validation du modèle de turbulence à partir du modèle de Birch avec un axe de symétrie.

**Tableau 1.** Conditions initiales et maillages utilisés pour la validation du modèle de turbulence à partir du modèle de Birch. La température est de 298.15 K.

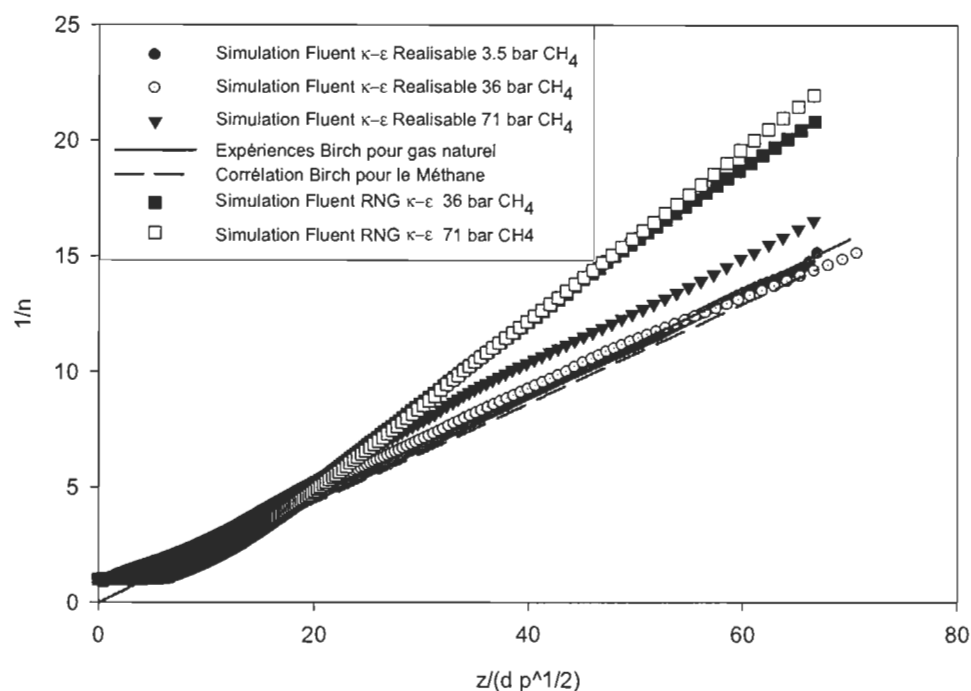
|                                   |      |      |      |
|-----------------------------------|------|------|------|
| <b>Pression de stockage (bar)</b> | 3.5  | 36   | 71   |
| <b>Débit gravimétrique (g/s)</b>  | 3.41 | 35.1 | 69.2 |

### 2.2.1 Résultats et analyse

Le résultat des simulations est présenté dans la figure 11 (la pression est mesurée). On constate d'abord que les simulations montrent que l'inverse de la concentration de méthane croît linéairement en fonction de la distance pour l'ensemble des pressions étudiées.

---

<sup>2</sup> « Mass Flow Inlet » et « Pressure Outlet » sont la terminologie de FLUENT pour les conditions aux frontières suivantes : débit massique entrant et pression de sortie constante (respectivement).



**Figure 11.** Comparaison des résultats pour le méthane avec le modèle de Birch.

Les simulations effectuées en utilisant le modèle  $\kappa$ - $\epsilon$  réalisable sont plus proches des résultats expérimentaux de Birch, ainsi que des prédictions de sa corrélation. Cette dernière étant calculée pour le méthane. L'écart entre les simulations effectuées en utilisant le modèle  $\kappa$ - $\epsilon$  réalisable et la corrélation de Birch est particulièrement faible pour les pressions de 3.5 et 36 bars. Les résultats de la simulation pour la pression de 71 bar s'écartent systématiquement un peu plus des résultats expérimentaux de Birch.

Le tableau 2 résume les résultats des simulations à plusieurs points situés le long de l'axe du jet. Les données obtenues sont comparées à la corrélation de Birch évaluée à chacun de ces points. La corrélation de Birch est donnée par l'équation (82). La distance axiale normalisée (première colonne) est donnée par  $Z/(d \cdot P^{1/2})$ ,  $Z$  étant la distance le long de l'axe du jet,  $d$  le diamètre de l'orifice et  $P$  la pression, exprimée relativement à la pression ambiante du milieu dans lequel le jet se développe.

**Tableau 2.** Résultats des simulations avec le modèle  $\kappa$ - $\epsilon$  réalisable de l'inverse de la fraction molaire ( $1/\eta$ ) pour plusieurs pressions, comparés aux prédictions de la corrélation de Birch (équation 82).

| Distance axiale normalisée* | $1/\eta$ à 3.5 bar | $1/\eta$ à 36 bar | $1/\eta$ à 71 bar | $1/\eta$ selon Birch | % Écart 3.5 bar | % Écart 36 bar | % Écart 71 bar |
|-----------------------------|--------------------|-------------------|-------------------|----------------------|-----------------|----------------|----------------|
| 10                          | 2.3                | 2.5               | 2.6               | 2.3                  | 0.9             | 8.7            | 13.0           |
| 20                          | 4.5                | 4.8               | 5.2               | 4.4                  | 3.1             | 8.0            | 17.3           |
| 30                          | 6.8                | 7.1               | 7.7               | 6.5                  | 3.8             | 8.6            | 17.7           |
| 40                          | 8.9                | 9.2               | 10.3              | 8.7                  | 3.5             | 6.0            | 18.5           |
| 50                          | 11.1               | 11.4              | 12.5              | 10.8                 | 3.2             | 5.9            | 15.3           |
| 60                          | 13.4               | 13.1              | 14.9              | 13.0                 | 2.3             | 0.6            | 14.2           |
| Écart relatif moyen         |                    |                   |                   |                      | 2.8             | 6.3            | 16.0           |
| Écart moyen caractéristique |                    |                   |                   |                      | 8.4             |                |                |

\*La distance axiale normalisée est donnée par  $Z / (d \cdot P^{1/2})$ , où  $Z$  est la distance en m,  $P$  la pression relative à la pression ambiante du milieu et  $d$  le diamètre de l'orifice du jet.

## 2.3 Validation avec la corrélation de Pitts

Pitts *et al* [11] ont réalisé des expériences des jets turbulents verticaux dans l'air en utilisant plusieurs gaz dont le méthane, d'où ils ont tiré une corrélation basée sur la fraction massique :

$$\frac{Y_0}{Y_m} = K_c \frac{z - (z_0)_y}{r_\epsilon} \quad (92)$$

où

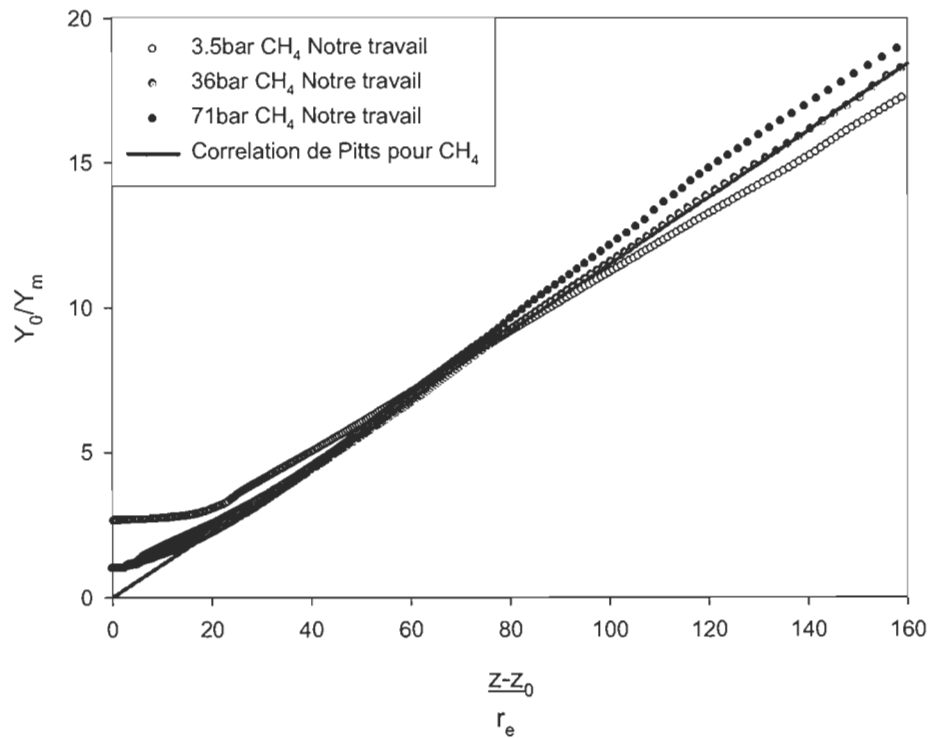
$$r_\epsilon = r_0 \left( \frac{\rho_0}{\rho_\alpha} \right)^{1/2} \quad (93)$$

Dans l'équation (88),  $Y_0$  est la fraction massique à la sortie du gaz,  $Y_m$  est la fraction massique le long de la ligne centrale du jet,  $K_c$  est la constante de décroissance (la valeur utilisée par Pitts [11] était de 0.115 pour le méthane),  $z$  est l'étendue du jet,  $(z_0)_y$  est l'origine virtuelle (la valeur de cette dernière quantité est suffisamment faible pour être

négligeable),  $r_e$  est le rayon effectif qui correspond au rayon d'une tuyère (avec une densité  $\rho_a$  au lieu de  $\rho_o$ , où  $\rho_o$  est la densité du jet),  $\rho_a$  est la densité ambiante et  $r_o$  le rayon du jet.

### 2.3.1 Résultats et analyse

Les résultats des simulations des jets libres verticaux obtenus de la validation de Birch *et al* ont été comparés avec la corrélation Pitts (voir la figure 12). On constate qu'en général, l'inverse de la fraction de masse croît linéairement en fonction de la distance, illustrant un excellent accord entre les simulations et le modèle, avec une erreur moyenne totale de 5.5%.



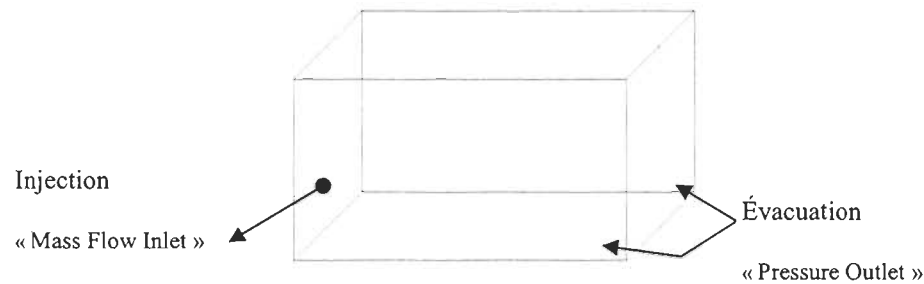
**Figure 12.** Comparaison des résultats pour le méthane avec le modèle de Pitts.

## 2.4 Validation avec Houf *et al*.

Nous avons retenu deux expériences de Houf *et al* [17] pour fins de validation du modèle.



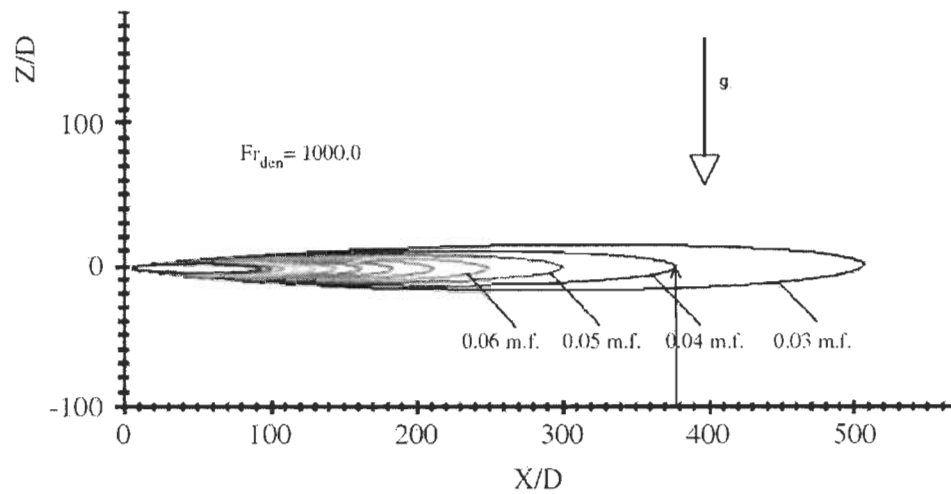
La première correspond à un épanchement d'hydrogène à pression, température et débit constants. Le jet libre turbulent vertical se développe à partir d'un orifice de 1.905 mm de diamètre. La vitesse à la sortie du jet est de 133.91 m/s, avec une densité de  $0.0838 \text{ Kg/m}^3$ , un nombre de Reynolds de 2,384 et un nombre densimétrique de Froude de 268 [17] [9]. Les dimensions du domaine de la simulation (illustré dans la figure 13) étaient  $1.2 \times 0.3 \times 0.3 \text{ m}^3$ , avec un maillage non structuré comportant 764,266 éléments.



**Figure 13.** Volume de contrôle pour la validation à partir du modèle de Houf *et al.* Les conditions aux frontières sont indiquées sur la figure. La taille du domaine est de  $1.2 \times 0.3 \times 0.3 \text{ m}$ .

La seconde expérience utilisée pour fins de validation correspond à un jet libre subsonique horizontal d'hydrogène. Les profils de concentration obtenus par Houf sont donnés dans la figure 14.

Les paramètres et modèles utilisés pour la simulation sont les suivants : un diamètre de 5 mm, une température et une pression aux conditions ambiantes (298.15 K et 101.35 kPa) et un débit de 2.11 g/s (le nombre de Froude correspond à 1000). La géométrie pour effectuer la simulation était un domaine rectangulaire tridimensionnel de  $30 \times 20 \times 20 \text{ m}^3$  avec un maillage non structuré comprenant 377,698 éléments. Les deux simulations ont été réalisées en utilisant le modèle de turbulence "k-ε réalisable".

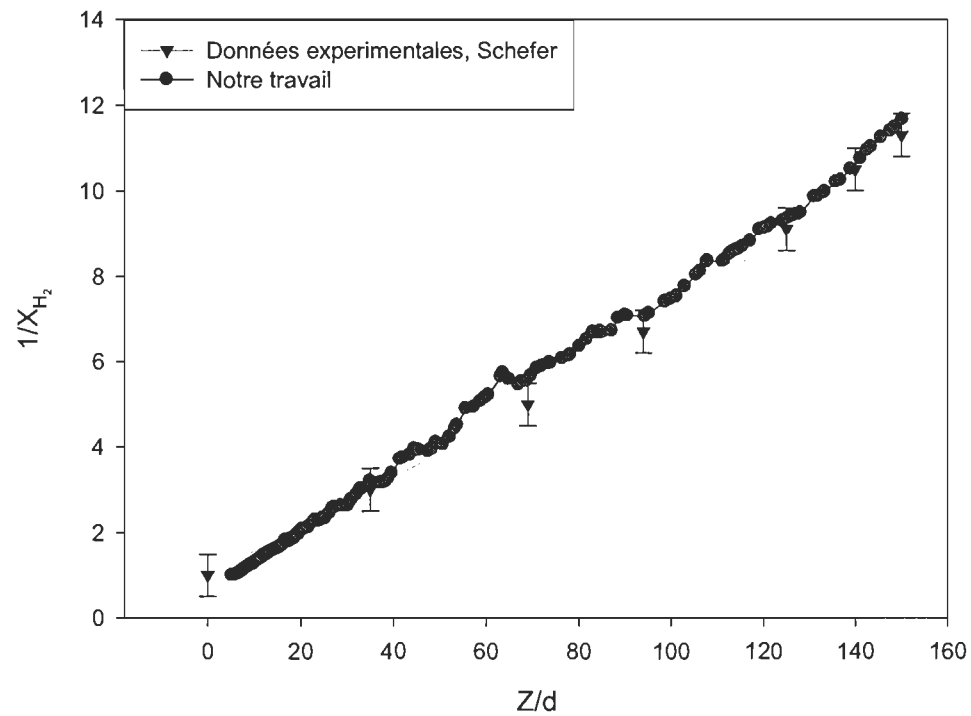


**Figure 14.** Contours de concentration de fraction molaire d'hydrogène pour une fuite horizontale pour un nombre Froude de 1000 en état stationnaire, tels qu'obtenus par Houf *et al.* Les distances sont normalisées par le diamètre de l'orifice du jet. Tiré de la référence [9] .

## 2.4.1 Résultats et analyse

### 2.4.1.1 Premier cas: Jet libre vertical, Froude 268

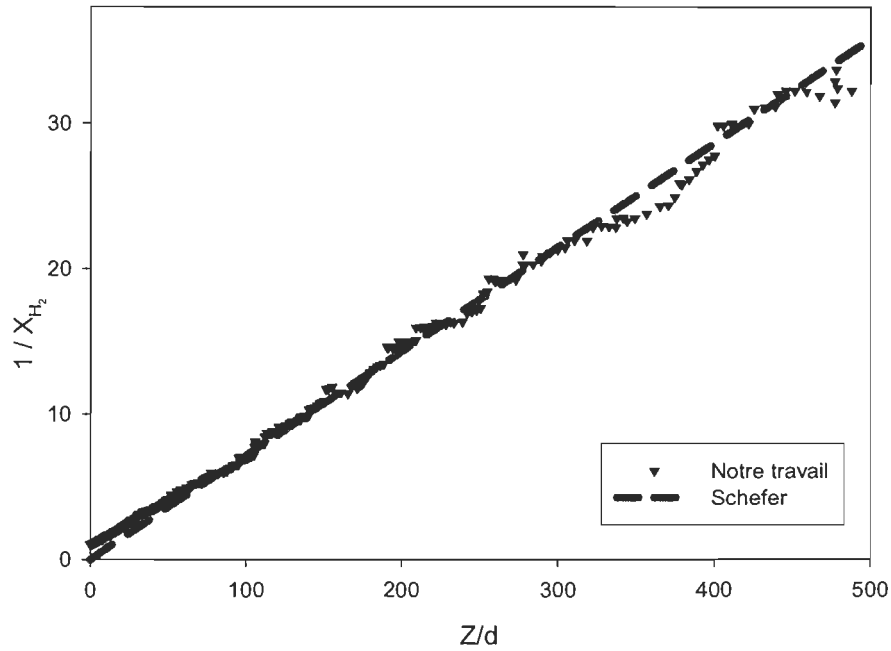
Les résultats des simulations obtenues pour le premier cas (nombre de Froude 268) sont présentés dans la figure 15, qui montre l'inverse de la concentration molaire en fonction de la distance. Les simulations effectuées par le modèle de turbulence K- $\epsilon$  réalisable de FLUENT sont totalement en concordance avec les résultats de Houf avec un écart moyen de seulement 5.17 %.



**Figure 15.** L'inverse de la fraction molaire en fonction de la distance normalisée par le diamètre de la fuite.

#### 2.4.1.2 Second cas : Jet libre horizontal, Froude 1000

Les résultats de la simulation effectuée avec FLUENT sont en excellent accord avec les résultats de Houf pour le jet horizontal d'hydrogène avec nombre Froude de 1000, avec un écart moyen total de seulement 0.8 % (voir figure 16).

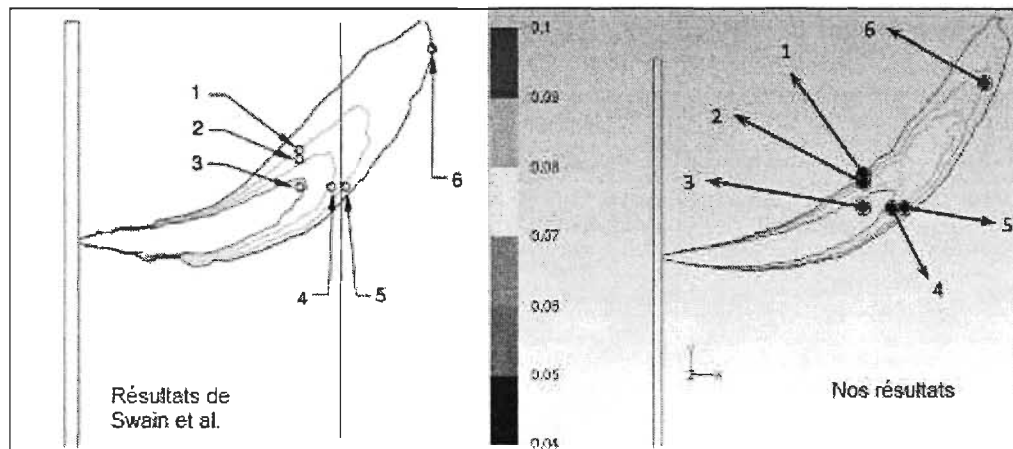


**Figure 16.** L'inverse de la fraction molaire en fonction de la distance normalisée par le diamètre de la fuite.

## 2.5 Validation avec les expériences de Swain *et al*

L'expérience classique de Swain *et al* [20] considère un jet d'hydrogène horizontal turbulent, dans les conditions de température et pression ambiantes et avec un débit quasi-constant. Swain *et al* ont effectué une étude expérimentale. Le diamètre de l'orifice de la fuite était de 9.45 mm. L'orifice était situé à 1.22 m du sol. La vitesse de la fuite était de 134.5 m/s à la sortie, ce qui correspondait à un débit de  $7.9 \times 10^{-4}$  kg/s. La densité de l'hydrogène à la sortie était de  $0.0838 \text{ kg/m}^3$ , avec un nombre de Reynolds de 12,124 et un nombre de Froude densimétrique de 120. La simulation a été effectuée sur un domaine de dimensions  $40 \times 40 \times 40$  m avec un maillage non structuré de 1,500,000 éléments.

### 2.5.1 Résultats et analyse



**Figure 17.** Comparaison du profil de concentration molaire de l'hydrogène avec l'expérience de Swain *et al.* La concentration molaire aux points indiqués sur le graphique est donnée dans le tableau 3.

Les profils de concentration molaire d'hydrogène sur le plan de symétrie du jet obtenus des simulations affichent une bonne concordance avec les données expérimentales de Swain [20] (voir la figure 17). Le tableau 3 montre une bonne concordance entre les résultats de la simulation que nous avons effectuée avec les résultats de Swain *et al* à l'état d'équilibre.

**Tableau 3.** Comparaison de nos résultats avec les valeurs expérimentales de Swain *et al.*

| Point   | Distance du mur (m) | Distance du sol | Données expérimentales de Swain <i>et al</i> | Moyenne des résultats expérimentaux | Résultats (notre travail) | % Écart |
|---------|---------------------|-----------------|--|-------------------------------------|---------------------------|---------|
| 1       | 1.22                | 1.73            | 5 - 5.9                                      | 5.45                                | 4.16                      | 23.7    |
| 2       | 1.22                | 1.68            | 5.6 - 7                                      | 6.3                                 | 5.81                      | 7.8     |
| 3       | 1.22                | 1.52            | 9.4 - 10.8                                   | 10.1                                | 10.99                     | 8.8     |
| 4       | 1.4                 | 1.52            | 8.1 - 9.4                                    | 8.75                                | 7.84                      | 10.4    |
| 5       | 1.47                | 1.52            | 5.6 - 6.6                                    | 6.1                                 | 5.7                       | 6.6     |
| 6       | 1.96                | 2.29            | 3.5 - 4.6                                    | 4.05                                | 5.075                     | 25.3    |
| Moyenne |                     |                 |  |                                     |                           | 13.8    |

## 2.6 Conclusion

La validation du choix du modèle  $k-\varepsilon$  réalisable avec les expériences et corrélations discutées dans les sections précédentes montre une précision acceptable pour des jets de méthane et d'hydrogène sous plusieurs conditions : écoulements subsoniques et supersoniques, jets verticaux et horizontaux, maillages bidimensionnels (exploitant la symétrie cylindrique des jets verticaux) et tridimensionnels, ainsi que pour différents diamètres d'orifice. Ces résultats valident de façon raisonnable notre choix du modèle  $k-\varepsilon$  réalisable pour les simulations de jets de surface, présentées dans le chapitre suivant.

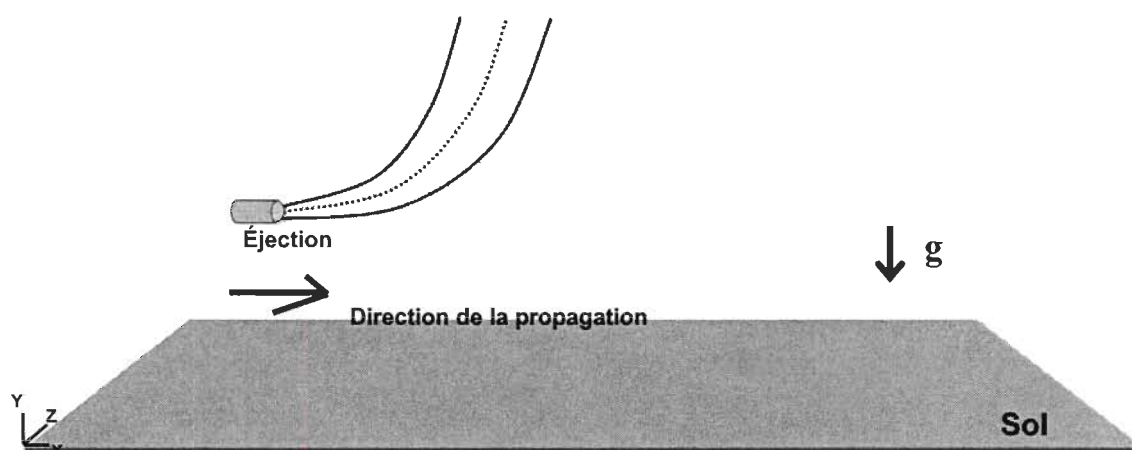
## CHAPITRE III : JETS DE SURFACE

L'objectif de ce chapitre est de déterminer l'étendue inflammable (par concentration molaire) d'un jet d'hydrogène et de méthane subsonique. L'étendue inflammable du jet est déterminée par la taille des contours de fraction molaire à 4 % pour l'hydrogène et à 5 % pour le méthane dans l'air. Ces contours correspondent à la limite inférieure d'inflammabilité. L'étendue maximale de ces contours sera mesurée le long de l'axe du jet. Nous mesurerons spécifiquement l'étendue axiale, le long de l'axe normal passant par le centre de l'orifice de la fuite, et l'étendue maximale, qui est l'étendue la plus grande du domaine inflammable du jet (orienté, lui aussi, le long de l'axe). Pour les cas étudiés dans ce travail, les deux définitions de l'étendue ne diffèrent appréciablement qu'en présence de gravité.

FLUENT a été utilisé pour étudier l'impact de la présence d'une surface sur la concentration inflammable de jets subsoniques d'hydrogène et de méthane. Les jets étudiés sont issus d'un orifice de 6 mm et possèdent des nombres de Froude de 50, 250, 500, 750 et 1000. Nous avons limité l'étude aux jets horizontaux situés à proximité du sol. La normale à la surface est donc perpendiculaire à l'axe du jet et orientée dans le sens contraire de la gravité (voir figure 18). Pour étudier l'impact de la surface, trois distances (hauteurs) entre la surface et l'orifice du jet ont été considérées, soit 0.05, 0.2 et 0.5 m. Les simulations ont été effectuées en régime stationnaire avec un débit constant, en utilisant un solveur séquentiel au premier ordre.<sup>3</sup>

---

<sup>3</sup> La description du modèle est présentée dans les annexes.



**Figure 18.** Représentation schématique de la simulation des jets horizontaux près du sol.

### 3.1 Géométrie utilisée pour les simulations des jets de surface

Le maillage utilisé dans les simulations était structuré. Il a été conçu en utilisant Workbench 2.0 (l'outil de maillage de FLUENT). Les dimensions du domaine de simulation et la résolution du maillage ont été choisies de façon à ce que les limites d'inflammabilité se situent loin des frontières, tout en tenant compte du diamètre de l'orifice (6 mm) et des trois différentes hauteurs de celui-ci par rapport au sol.

Les caractéristiques des maillages utilisés dans les simulations sont présentées dans le tableau 4 et le tableau 5 pour l'hydrogène le méthane, respectivement.

**Tableau 4.** Paramètres de la géométrie pour la modélisation des jets d'hydrogène et de méthane.

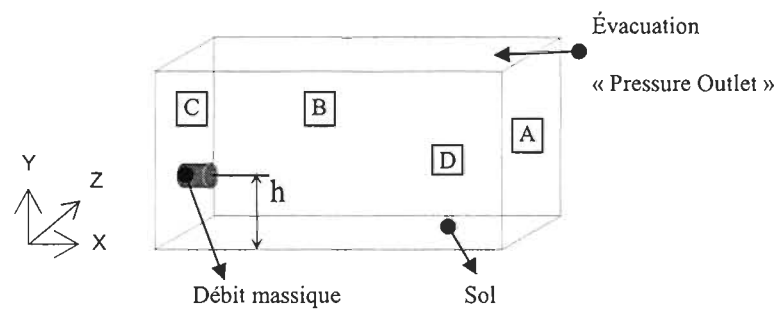
| Distance du sol (m) |                   | 0.05     | 0.2    | 0.5    | Jet libre | Jet libre sans gravité |
|---------------------|-------------------|----------|--------|--------|-----------|------------------------|
| Fr 50               | Dimension (m)     | 3×6×4    | 3×6×3  | 3×6×3  | 3×10× 3   | 80× 40×40              |
|                     | Nombre d'éléments | 310763   | 355522 | 386267 | 421930    | 632448                 |
| Fr 250 à 100        | Dimension (m)     | 30×20×20 |        |        |           | 80×40× 40              |
|                     | Nombre d'éléments | 523088   | 377698 | 412509 | 372295    | 632448                 |



**Tableau 5.** Paramètres de la géométrie pour la modélisation des jets de méthane.

| Distance du sol (m) |                   | 0.05     | 0.2    | 0.5    | Jet libre | Jet libre sans gravité |
|---------------------|-------------------|----------|--------|--------|-----------|------------------------|
| Fr 50               | Dimension (m)     | 3×6×4    | 3×6×3  | 3×6×3  | 3×10×3    | 30× 20× 20             |
|                     | Nombre d'éléments | 579652   | 545214 | 558313 | 565540    | 372295                 |
| Fr 250 à 100        | Dimension (m)     | 30×20×20 |        |        |           |                        |
|                     | Nombre d'éléments | 523088   | 377698 | 412509 | 372295    | 372295                 |

La géométrie du domaine utilisé pour les simulations des jets est donnée dans la figure 19. La dispersion à partir de l'orifice du jet est parallèle au sol. La force gravitationnelle est orientée de façon perpendiculaire au sol et à la direction de dispersion du jet.

**Figure 19.** Géométrie et conditions aux frontières pour les jets de surface.

### 3.2 Conditions aux frontières et paramètres de la simulation

Les simulations ont été réalisées avec les conditions aux frontières suivantes (figure 19) :

- La surface de l'orifice à l'origine du jet dans le domaine est définie comme une entrée de fluide à débit massique constant ("mass flow inlet").
- Le sol est défini comme un mur ("Wall").
- Les parois latérales A, B, C et D sont définies comme des murs ("walls").
- La sortie du haut, le plafond, est définie comme une surface à pression constante ("pressure outlet").

La terminologie utilisée par FLUENT pour les conditions aux frontières est indiquée entre parenthèse.

Les propriétés des gaz utilisées pour les simulations sont spécifiées dans le tableau 6 ci-bas.

**Tableau 6.** Propriétés du gaz utilisées dans les simulations de jets de surface discutées dans cette section.

| Propriété                                       | CH <sub>4</sub>       | H <sub>2</sub>        |
|---|-----------------------|-----------------------|
| Densité (en kg/m <sup>3</sup> )                 | 0.66799               | 0.0838                |
| Coefficient de diffusion (en m <sup>2</sup> /s) | $1.60 \times 10^{-5}$ | $6.10 \times 10^{-5}$ |
| Rapport des chaleurs spécifiques (sans unité)   | 1.31                  | 1.41                  |
| Constante des gaz (en J/(mole K))               | 518.4                 | 4124.38               |
| Viscosité dynamique (en kg/m s)                 | $1.09 \times 10^{-5}$ | $8.80 \times 10^{-6}$ |
| Viscosité cinématique (en m <sup>2</sup> /s)    | $1.63 \times 10^{-5}$ | $1.05 \times 10^{-4}$ |

### 3.2.1 Hypothèses

Nous considérons que les jets turbulents subsoniques proviennent d'un orifice rond qui sépare un dispositif pressurisé du milieu ambiant. Le gaz pressurisé se disperse dans ce dernier sous la forme d'un jet. Le milieu ambiant est au repos initialement. Les gaz sont considérés comme étant parfaits. Le milieu est supposé isotrope.

Le domaine de la simulation commence ainsi à l'orifice du jet : la tuyère n'est pas modélisée. Le débit massique est spécifié à l'orifice. Les simulations sont effectuées aux conditions ambiantes standards, c'est-à-dire à une pression de 101,325 Pa et une température de 298.15 K.

Les débits des jets ont été déterminés par leur nombre de Froude via la vitesse à l'orifice, qui est calculée en supposant que le fluide émerge d'une tuyère et subit une détente isentropique. Ils sont donnés dans les tableaux 7 et 8, pour l'hydrogène et le méthane (respectivement).

**Tableau 7.** Conditions entrantes des jets : nombre de Froude, débits, vitesse d'injection à l'orifice ( $U_{\text{sortie}}$ ) et nombre de Reynolds pour l'hydrogène ( $H_2$ ).

| Nombre de Froude | $H_2$       |                           |       |
|------------------|-------------|---------------------------|-------|
|                  | Débit (g/s) | $U_{\text{sortie}}$ (m/s) | Re    |
| 50               | 0.11        | 44.45                     | 2540  |
| 250              | 0.53        | 222.25                    | 12700 |
| 500              | 1.05        | 444.50                    | 25400 |
| 750              | 1.58        | 666.75                    | 38100 |
| 1000             | 2.11        | 889.00                    | 50800 |

Le débit élevé et la vitesse de sortie plus faible du méthane (tableau 8) par rapport à l'hydrogène (tableau 7) sont dus à la masse molaire plus élevée du méthane.

**Tableau 8.** Conditions entrantes des jets : nombre de Froude, débits, vitesse d'injection à l'orifice ( $U_{\text{sortie}}$ ) et nombre de Reynolds pour le méthane ( $CH_4$ ).

| Nombre de Froude | $CH_4$      |                           |       |
|------------------|-------------|---------------------------|-------|
|                  | Débit (g/s) | $U_{\text{sortie}}$ (m/s) | Re    |
| 50               | 0.21        | 10.92                     | 4025  |
| 250              | 1.03        | 54.58                     | 20126 |
| 500              | 2.06        | 109.17                    | 40252 |
| 750              | 3.09        | 163.75                    | 60378 |
| 1000             | 4.12        | 218.34                    | 80504 |

Les paramètres de turbulence (c'est-à-dire l'intensité turbulente et l'échelle de longueur caractéristique de la turbulence) sont obtenus en employant les corrélations recommandées par Ansys (FLUENT). Ils sont détaillés en annexe de ce mémoire.

### 3.3 Résultats des simulations

Les résultats des simulations effectuées sur l'hydrogène et le méthane sont présentés dans cette section pour les jets en présence de surfaces situées à 0.05m, 0.2m et 0.5 m de l'orifice. Des simulations de référence ont également été effectuées pour des jets horizontaux libres aux mêmes conditions. Nous avons également effectué quelques simulations de jets en présence de surfaces en l'absence de gravité pour l'hydrogène pour isoler leur contribution à la structure du jet. Par contre, les seules simulations de méthane effectuées en l'absence de gravité ont été faites à titre indicatif pour le jet libre, puisque les forces de flottaison exercées sur le jet de méthane sont beaucoup moins importantes que celles exercées sur l'hydrogène, étant donné les valeurs relativement comparables des masses molaires du méthane et des constituantes de l'air. Les profils de concentration obtenus des simulations sont présentés dans la section 3.3.1, et les étendues inflammables, tirés de ces profils, sont donnés dans la section 3.3.2.

#### 3.3.1 Profils de concentration

Les profils de concentration obtenus pour les simulations effectuées sur l'hydrogène et le méthane sont présentés dans les figures données dans les tableaux 9 à 20 ci-dessous. Les conditions initiales correspondantes sont spécifiées dans les tableaux 7 et 8. Les tableaux 9 à 15 montrent les profils de concentration obtenus pour l'hydrogène à 50 % de la limite inférieure d'inflammabilité (soit 2 %) (colonne de gauche) et à 4 % (colonne de droite), ce qui correspond à la limite inférieure d'inflammabilité. Les tableaux 16 à 20 donnent les résultats pour le méthane, à 50 % de la limite inférieure d'inflammabilité (soit 2.5 %) (colonne de gauche) et à 5 % (colonne de droite), en fonction de la hauteur de l'orifice à la surface.

Qualitativement, on constate que l'étendue maximale inflammable du jet croît en fonction du nombre de Froude. L'étendue est donc déterminée par l'impulsion du jet pour une espèce donnée. Les différences entre les propriétés de l'hydrogène et du méthane, tel que la densité et la diffusivité, font de l'hydrogène un gaz plus sensible aux effets de flottaison. Le méthane, par contre, est plus sensible aux changements de la quantité de mouvement.

On remarque une augmentation locale de la concentration d'hydrogène et de méthane près de la surface, due à la réflexion par la surface des molécules, ce qui donne, pour les jets dominés par l'impulsion, l'impression que le jet est attiré par la surface. Cette augmentation est observée pour les jets de surface d'hydrogène en l'absence de gravité (tableaux 14 et 15) et de méthane situés très près du sol (tableau 16).

En l'absence de gravité (tableaux 13 à 15 pour l'hydrogène et tableau 20 pour le méthane), on remarque que l'étendue maximale du profil de concentration ne dépend pratiquement pas du débit du jet pour l'hydrogène et le méthane, quelle que soit la proximité à la surface. Ceci est en accord avec les prédictions du modèle pour les jets libres (tableaux 13 et 20) présentées dans la première partie de ce travail (équations 73 et 74) et qui a été dérivé en négligeant l'effet de la gravité.

On note ensuite que l'étendue inflammable des jets d'hydrogène est plus importante que celle des jets de méthane, ce qui est également prédit par le modèle, puisque la constante de dilution est proportionnelle à la racine carrée du rapport de la masse molaire de l'air sur la masse molaire des constituantes du jet. Pour l'hydrogène, ce rapport vaut environ 3.8 alors que pour le méthane, il vaut 1.3.

Les profils de concentration du méthane et de l'hydrogène, le long de l'axe d'un jet en l'absence de gravité, serait donc donné, respectivement par :

$$c(x) = 1.3 \frac{C_0}{x} \quad (94)$$

$$c(x) = 3.8 \frac{C_0}{x} \quad (95)$$

$C_0$  étant une constante numérique qui est déterminée par les moments des fonctions d'échelle. On s'attend ainsi à un rapport d'environ 2.8 entre l'étendue des jets d'hydrogène et de méthane à concentration fixe en l'absence de gravité.

Si maintenant on veut comparer les étendues inflammables de l'hydrogène et du méthane, dont les limites d'inflammabilité sont de 0.04 et de 0.05 par volume respectivement, on note que

$$0.05 = 1.3 \frac{C_0}{x_{CH_4}} \quad (96)$$

donc

$$x_{CH_4} = C_0 \frac{1.3}{0.05} = 26C_0 \quad (97)$$

alors que

$$x_{H_2} = C_0 \frac{3.8}{0.04} = 95C_0 \quad (98)$$

Si les moments des fonctions d'échelle sont les mêmes pour l'hydrogène et le méthane, on s'attend ainsi à un rapport d'environ de 3.65 entre les étendues inflammables pour des jets subsoniques.



**Tableau 10.** Contours de concentration inflammable pour l'hydrogène si l'orifice est situé à 0.2 m du sol. Les débits associés aux nombres de Froude sont donnés dans le tableau 7.



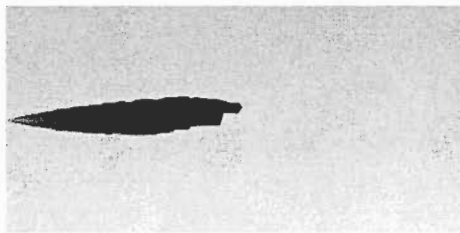



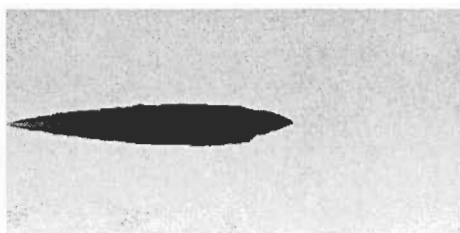

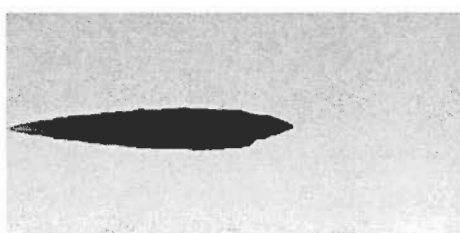

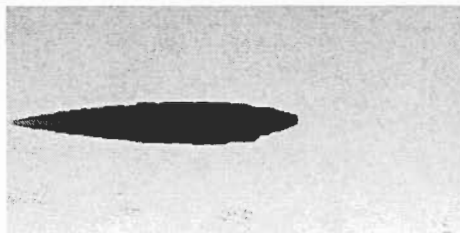
| Échelle<br>de la<br>fraction<br>molaire<br>de H <sub>2</sub> | Gaz                 |  | 4 % H <sub>2</sub> | 2 % H <sub>2</sub> |
|--|---------------------|--|--------------------|--------------------|
|  | Nombre<br>de Froude |  |                    |                    |
|  | 1.0                 |  |                    |                    |
|  | 50                  |  |                    |                    |
|  | 250                 |  |                    |                    |
|  | 500                 |  |                    |                    |
|  | 750                 |  |                    |                    |
| 1000   |                     |  |                    |                    |





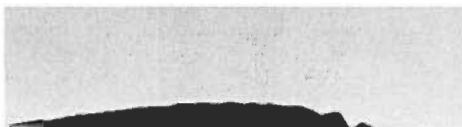












**Tableau 13.** Contours de concentration inflammable pour des jets libres d'hydrogène à zéro gravité. Les débits indiqués dans la seconde colonne correspondent aux nombres de Froude des tableaux 9 à 12.

| Échelle<br>de la<br>fraction<br>molaire<br>de H <sub>2</sub>                       | Gaz         |   | 4 % H2  | 2 % H2 |
|--|-------------|---|---|--------|
|  | Débit (g/s) |   |   |        |
|  | 1.0         |   |   |        |
|  | 0.11        |    |    |        |
|  | 0.53        |   |   |        |
|  | 1.05        |  |  |        |
|  | 1.58        |  |  |        |
|  | 2.11        |  |  |        |
| 0.0  |             |   |   |        |

**Tableau 14.** Contours de concentration inflammable pour l'hydrogène si l'orifice est situé à 0.05 m du sol à zéro gravité. Les débits indiqués dans la seconde colonne correspondent aux nombres de Froude des tableaux 9 à 12.

| Échelle<br>de la<br>fraction<br>molaire<br>de H <sub>2</sub>                       | Gaz         |  | 4 % H <sub>2</sub>  | 2 % H <sub>2</sub> |
|--|-------------|--|---|--------------------|
|  | Débit (g/s) |  |   |                    |
|  | 1.0         |  |   |                    |
|  | 0.11        |    |    |                    |
|  | 0.53        |   |   |                    |
|  | 1.05        |  |  |                    |
|  | 1.58        |  |  |                    |
|  | 2.11        |  |  |                    |

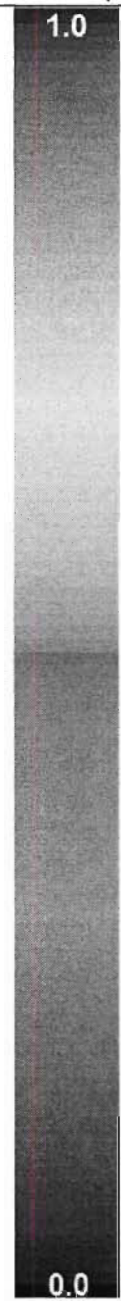

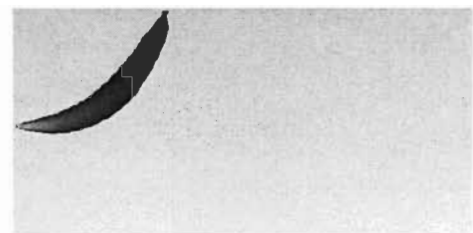



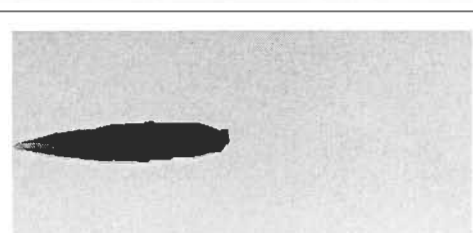

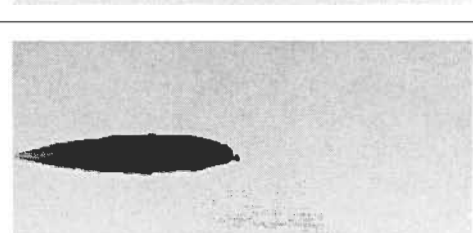
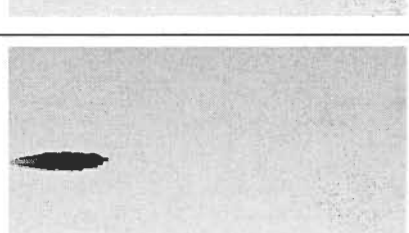
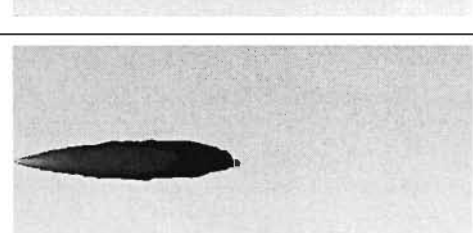








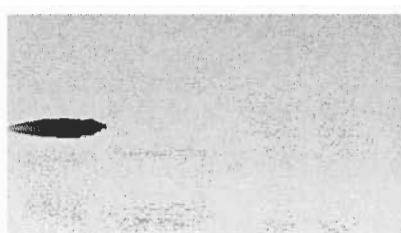
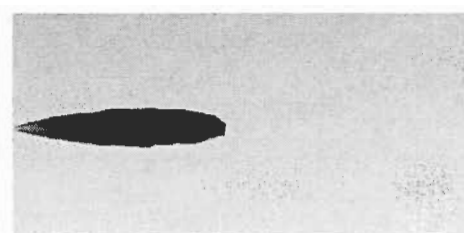
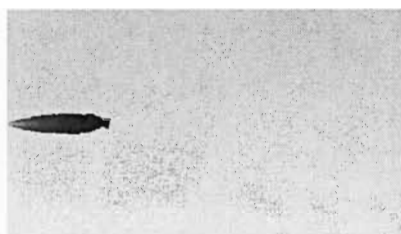
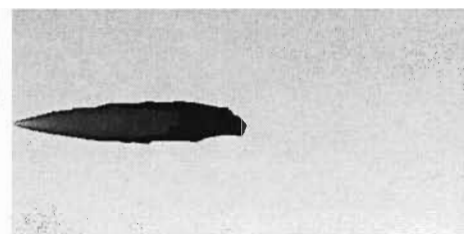
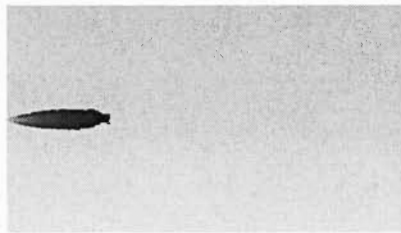
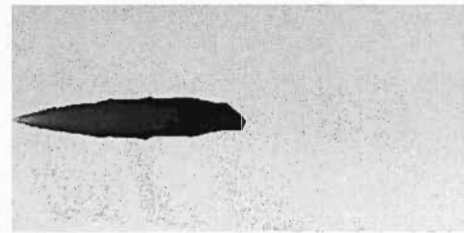

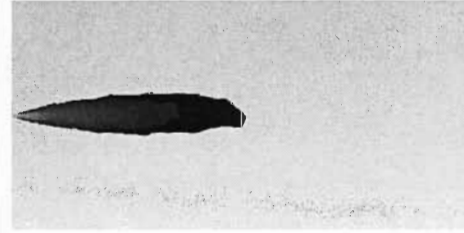

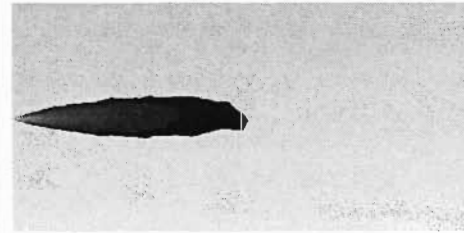
**Tableau 18.** Contours de concentration inflammable pour le méthane si l'orifice est situé à 0.5 m du sol. Les débits associés aux nombres de Froude sont donnés dans le tableau 8.

| Échelle<br>de la<br>fraction<br>molaire<br>de CH <sub>4</sub>                      | Gaz                 |  | 5 % CH <sub>4</sub>   | 2.5 % CH <sub>4</sub> |
|--|---------------------|--|---|-----------------------|
|  | Nombre<br>de Froude |  |   |                       |
|  | 1.0                 |  |   |                       |
|  | 50                  |    |    |                       |
|  | 250                 |   |   |                       |
|  | 500                 |  |  |                       |
|  | 750                 |  |  |                       |
|  | 1000                |  |  |                       |
| 0.0  |                     |  |   |                       |





**Tableau 20.** Contours de concentration inflammable pour des jets libres de méthane à zéro gravité. Les débits indiqués dans la seconde colonne correspondent aux nombres de Froude des tableaux 16 à 19.

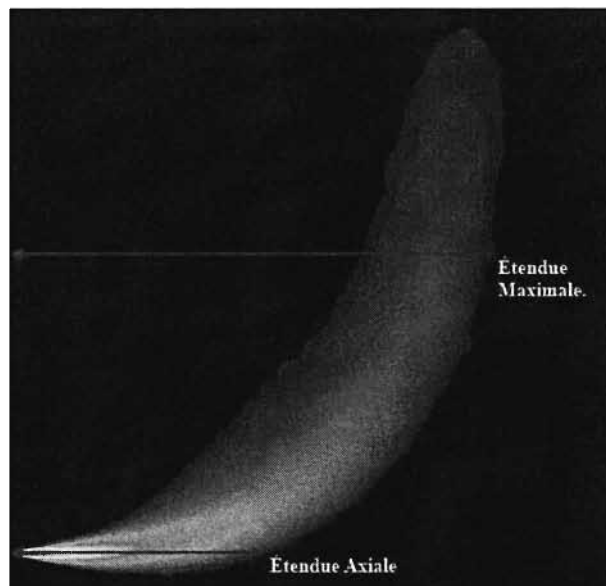
| Échelle<br>de la<br>fraction<br>molaire<br>de CH <sub>4</sub> | Gaz         |   | 5 % CH <sub>4</sub>  | 2.5 % CH <sub>4</sub> |
|---|-------------|---|--|-----------------------|
|   | Débit (g/s) |   |  |                       |
| <div>1.0</div> <div></div> <div>0.0</div>                     | 0.21        |    |    |                       |
|   | 1.03        |   |   |                       |
|   | 2.06        |  |  |                       |
|   | 3.09        |  |  |                       |
|   | 4.12        |  |  |                       |

### 3.3.2 Étendue inflammable des jets d'hydrogène et de méthane : présentation des résultats

Les résultats obtenus sur l'étendue inflammable (qui correspond à la limite d'inflammabilité inférieure) dans la direction de l'axe défini par la normale à l'orifice du jet sont présentés dans les tableaux 21 et 22 pour l'hydrogène (avec et sans gravité respectivement), ainsi que les tableaux 23 et 24 pour le méthane (en présence et en absence de gravité, respectivement).

L'étendue maximale est définie comme la distance inflammable à l'orifice la plus lointaine atteinte par le jet, alors que l'étendue axiale réfère à l'étendue maximale située le long d'une droite correspondant à la normale à l'orifice, si cette dernière passe par le centre de ce dernier (voir la figure 20).

L'étendue axiale est plus faible que l'étendue maximale du jet à cause des effets de flottaison et de diffusion.



**Figure 20.** Définitions des étendues axiales et maximales.

**Tableau 21.** Résultats des simulations pour l'hydrogène. Étendue maximale totale et étendue axiale des jets en fonction de la hauteur et du nombre de Froude. Le jet libre correspond au cas limite d'une hauteur infinie. Les conditions à l'entrée sont données dans le tableau 7.

| Hauteur (m) | Étendue (m)  | Nombre de Froude |      |     |      |      |
|-------------|--------------|------------------|------|-----|------|------|
|             |              | 50               | 250  | 500 | 750  | 1000 |
| Jet Libre   | Maximale (m) | 0.67             | 1.75 | 2.1 | 2.2  | 2.3  |
|             | Axiale (m)   | 0.28             | 1.1  | 1.5 | 1.95 | 2    |
| 0.05        | Maximale (m) | 0.73             | 2.39 | 3.1 | 3.5  | 3.8  |
|             | Axiale (m)   | 0.32             | 2.2  | 2.9 | 3.2  | 3.7  |
| 0.2         | Maximale (m) | 0.72             | 1.78 | 2.4 | 2.5  | 3    |
|             | Axiale (m)   | 0.32             | 1.1  | 2.1 | 2.5  | 2.9  |
| 0.5         | Maximale (m) | 0.69             | 1.78 | 2.2 | 2.3  | 2.4  |
|             | Axiale (m)   | 0.32             | 1.4  | 1.6 | 1.7  | 2.1  |

**Tableau 22.** Résultats des simulations pour l'hydrogène en l'absence de gravité : étendue maximale totale et étendue axiale des jets en fonction de la hauteur et du débit. Les débits correspondent à ceux associés aux nombres de Froude spécifiés dans tableau 21.

| Hauteur (m) | Étendue (m)  | Débit (en g/s) |      |      |      |      |
|-------------|--------------|----------------|------|------|------|------|
|             |              | 0.11           | 0.53 | 1.05 | 1.58 | 2.11 |
| Jet Libre   | Maximale (m) | 2.27           | 2.39 | 2.57 | 2.63 | 2.68 |
|             | Axiale (m)   | 2.27           | 2.39 | 2.57 | 2.63 | 2.68 |
| 0.05        | Maximale (m) | 7.5            | 7.6  | 7.8  | 7.9  | 8.2  |
|             | Axiale (m)   | 3.9            | 3.9  | 4.0  | 4.0  | 4.2  |
| 0.2         | Maximale (m) | 7              | 7.2  | 7.3  | 7.37 | 7.48 |
|             | Axiale (m)   | 3.25           | 3.4  | 3.41 | 3.5  | 3.76 |

**Tableau 23.** Résultats des simulations pour le méthane : étendue maximale totale et étendue axiale des jets en fonction de la hauteur et du nombre de Froude. Le jet libre correspond à la limite d'une hauteur infinie. Les propriétés du jet à l'entrée associés au nombre de Froude sont donnés dans le tableau 8.

| Hauteur (m) | Étendue      | Nombre de Froude |      |      |      |      |
|-------------|--------------|------------------|------|------|------|------|
|             |              | 50               | 250  | 500  | 750  | 1000 |
| 0.05        | Maximale (m) | 0.63             | 0.91 | 0.96 | 1.00 | 1.00 |
|             | Axiale (m)   | 0.63             | 0.91 | 0.96 | 1.00 | 1.00 |
| 0.2         | Maximale (m) | 0.63             | 0.91 | 0.96 | 1.00 | 1.00 |
|             | Axiale (m)   | 0.33             | 0.86 | 0.9  | 0.96 | 0.97 |
| 0.5         | Maximale (m) | 0.63             | 0.68 | 0.72 | 0.72 | 0.74 |
|             | Axiale (m)   | 0.33             | 0.63 | 0.66 | 0.69 | 0.71 |
| Jet libre   | Maximale (m) | 0.62             | 0.66 | 0.66 | 0.66 | 0.66 |
|             | Axiale (m)   | 0.37             | 0.62 | 0.62 | 0.62 | 0.62 |

**Tableau 24.** Étendue inflammable d'un jet libre de méthane en fonction du débit en l'absence de gravité ( $g=0 \text{ m/s}^2$ ). Les débits utilisés dans ces simulations correspondent aux nombres de Froude du tableau 23.

| Hauteur (m) | Étendue      | Nombre de Froude |      |      |      |      |
|-------------|--------------|------------------|------|------|------|------|
|             |              | 50               | 250  | 500  | 750  | 1000 |
| Jet libre   | Maximale (m) | 0.63             | 0.63 | 0.63 | 0.64 | 0.64 |
|             | Axiale (m)   | 0.63             | 0.63 | 0.63 | 0.64 | 0.64 |

### 3.3.3 Analyse de résultats pour l'hydrogène et le méthane

Les étendues inflammables maximales et axiales des jets subsoniques d'hydrogène sont supérieures à celles des jets subsoniques de méthane à nombre de Froude égal. Pour les jets libres en l'absence de gravité, on remarque une relativement faible variation de l'étendue inflammable de 2.27 m à 2.68 m pour l'hydrogène en fonction du débit. On se rappelle que le modèle prédit que la taille de la région dominée par la turbulence ne

devrait pas varier en fonction du débit. La variation observée est probablement attribuable au changement de taille des régions d'induction (où le cœur potentiel est encore présent) et de transition du jet en fonction du débit. L'étendue des jets libres de méthane en l'absence de gravité, par contre, n'affiche qu'une très faible variation en fonction du débit (0.63 à 0.64 m).

Le rapport entre les étendues des jets libres d'hydrogène et de méthane sans gravité varie de 3.55 à 4.18, ce qui est raisonnablement proche du rapport de 3.65 discuté dans la section 3.3.1, et qui est prédit par le modèle du jet libre développé dans la section 1.1.2.3. Tel que mentionné dans le paragraphe précédent, il est probable que la variation soit causée par la présence des régions potentielles et de transition du jet à la distance, dont la taille ne varie pas selon une simple d'échelle, et qui peut dépendre du débit.

On constate ensuite qu'en présence de gravité, tous les jets qui impacte le sol présentent une augmentation de leur étendue maximale qui varie entre 50 % et 60 % de la taille du jet libre. En l'absence de gravité, pour l'hydrogène, cette augmentation est plus marquée, variant entre 180 % et 208 % de la taille du jet libre.

### 3.3.4 Effets de la distance au sol sur l'étendue inflammable

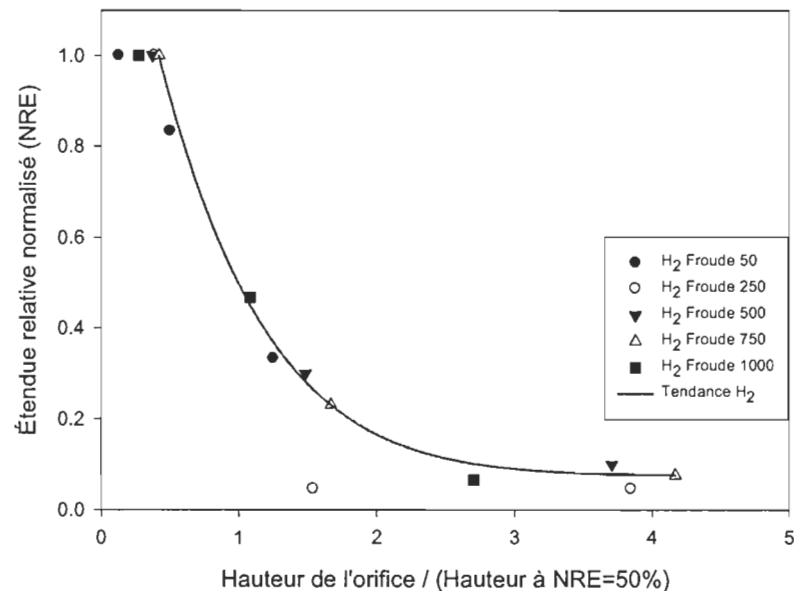
Nous chercherons, dans cette section, à comparer la variation des étendues inflammables en fonction de la proximité à une surface pour différents débits. On définit l'étendue relative normalisé (NRE, de l'acronyme anglais "Normalized Relative Extent") de la façon suivante :

$$NRE = \frac{X_{imax} - X_{Jet\_Libre}}{X_{max\_abs} - X_{Jet\_Libre}} \quad (99)$$

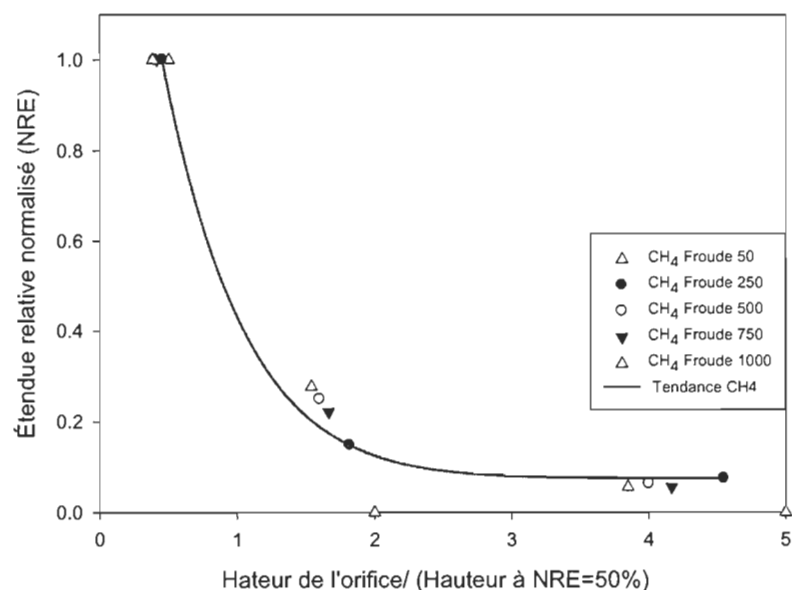
La variable  $X$  correspond à l'étendue de la limite inférieure d'inflammabilité,  $X_{max}$  correspond à l'étendue maximale du jet en question,  $X_{max\_abs}$  est l'étendue maximale de l'ensemble de jets étudiés (en principe la taille de l'étendue inflammable lorsque l'orifice est collé au sol), et  $X_{jet\_libre}$  correspond à l'étendue du jet libre. Le NRE mesure donc l'augmentation relative de la taille du jet par rapport au jet libre, normalisée par l'augmentation maximale subie par le jet en présence d'une surface. Cette quantité permet

de représenter sur une même figure l'effet de la proximité d'une surface sur l'étendue du jet.

Les figures 21 et 22 montrent le comportement de l'étendue relative normalisée (NRE) en fonction de la hauteur de l'orifice. Afin de comparer l'ensemble des résultats obtenus, pour chaque nombre de Froude étudié, la hauteur de l'orifice est normalisée par la hauteur correspondant à un  $NRE=0.5$ . On remarque que le comportement de la NRE est similaire pour tous les cas étudiés. Ce comportement suggère une loi d'échelle. Formellement cependant, un comportement d'échelle provient de la possibilité de réécrire les équations de Navier-Stokes sous forme adimensionnelle. Dans notre cas, la loi d'échelle est liée à la hauteur de l'orifice, qui correspond plutôt à une condition aux frontières. De plus, mettre les courbes du NRE en fonction de la distance en correspondance requiert la connaissance de la courbe en entier. La distance associée à  $NRE=0.5$  n'est pas, à priori, une propriété physique fondamentale du système.



**Figure 21.** Étendue relative normalisée (NRE) de jets subsoniques d'hydrogène, pour des nombres de Froude variant entre 50 et 1000, en fonction de la hauteur de l'orifice, normalisée par la hauteur correspondant à un NRE de 0.5. Le diamètre de l'orifice est de 6 mm.



**Figure 22.** Étendue relative normalisée (NRE) de jets subsoniques de méthane, pour des nombres de Froude variant entre 50 et 1000, en fonction de la hauteur de l'orifice, normalisée par la hauteur correspondant à un NRE de 0.5. Le diamètre de l'orifice est de 6 mm.

Il demeure toutefois intrigant de constater que les résultats, normalisés sous cette forme, semblent tous tomber sur la même courbe, que ce soit pour l'hydrogène ou le méthane.

### 3.3.5 Effet de la présence d'une surface sur le comportement du profil de concentration en fonction de la distance le long de l'axe du jet

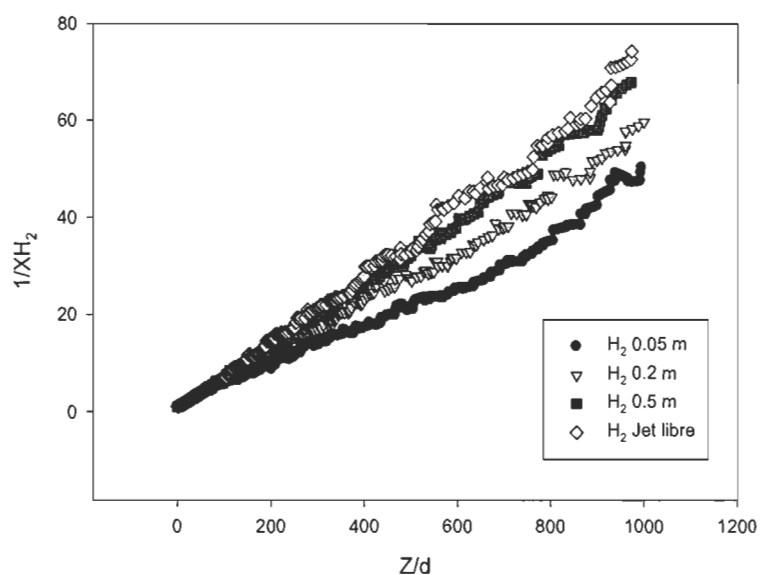
Nous étudions maintenant le comportement du profil de concentration molaire en fonction de la distance, telle que mesurée le long de la droite définie par la normale à la surface de l'orifice, et passant par le centre de ce dernier. Nous analysons d'abord, sans la sous-section 3.3.5.1, l'effet de la présence d'une surface, relativement aux propriétés d'un jet libre. L'effet de la gravité est discuté plus en détails dans la sous-section 3.3.5.1.

#### 3.3.5.1 Effet de la présence des surfaces

La figure 23 illustre l'effet du sol sur l'étendue inflammable des jets d'hydrogène le long de l'axe du jet, lorsque l'orifice est situé à une hauteur de 0.05, 0.2 et 0.5 m pour un



nombre de Froude de 1000. Le comportement de ce jet est essentiellement régi par la quantité de mouvement plutôt que les effets de bouée (voir la figure correspondant au nombre de Froude de 1000 dans les tableaux 9 à 12). On observe une dépendance essentiellement linéaire de l'inverse de la concentration sur la distance, avec toutefois une certaine déviation lorsque le jet est très rapproché du sol (à une hauteur de 0.05m). Ceci suggère que la proximité du sol n'introduit pas de nouveaux mécanismes associés à la dispersion turbulente du jet, et tend à préserver le comportement d'échelle de la région développée du jet. On constate de façon générale un changement de pente de la courbe qui change en fonction de la proximité au sol de l'axe du jet. Ceci indique un changement de la constante de dilution, ce qui suggère un changement des moments des fonctions d'échelle en fonction de la proximité au sol. Les conditions aux frontières semblent donc modifier les fonctions d'échelle du jet.

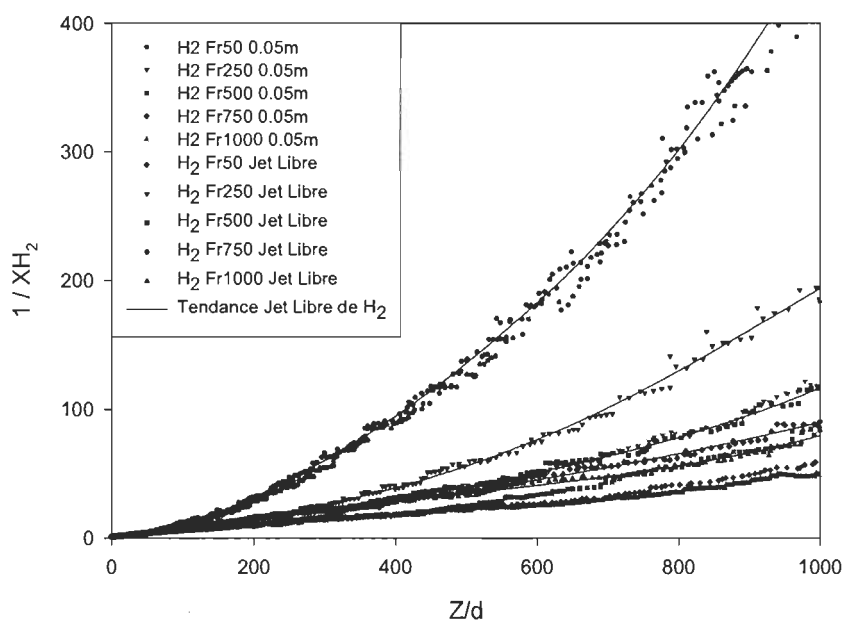


**Figure 23.** Comparaison entre le comportement de l'inverse de la fraction molaire d'hydrogène en fonction de la distance du jet libre et celui des jets d'hydrogène en présence de surfaces situées à 5, 20 et 50 cm de l'orifice. Le nombre de Froude est de 1000. La distance est normalisée par le diamètre de l'orifice.

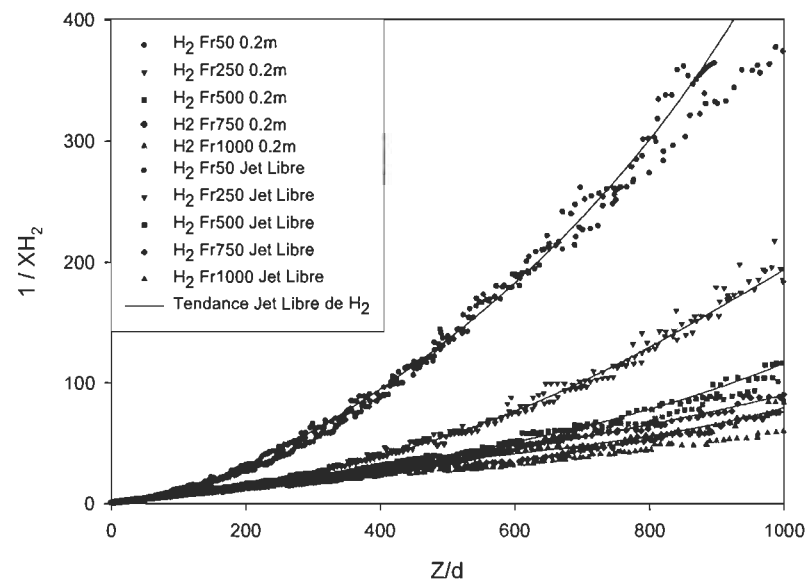
Les figures 24 à 26 présentent les résultats détaillés de la mesure l'inverse de la concentration molaire d'hydrogène en fonction de la distance normalisée par le diamètre de l'orifice, pour l'ensemble des nombres de Froude étudiés. Chaque figure montre les

résultats pour une hauteur de l'orifice donnée. Le comportement des jets dont le nombre de Froude est inférieur à 1000 est dominé par les forces de flottaison (tableaux 9 à 12). On constate que l'inverse de la concentration molaire en fonction de la distance semble suivre le comportement des jets libres correspondant, tel que le montrent les figures 24 à 26.

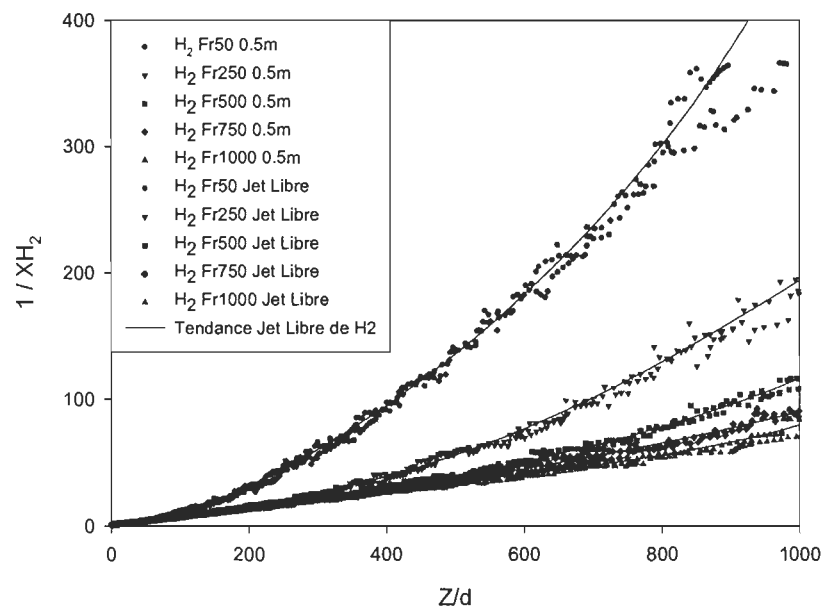
De façon générale, à cause de l'effet des forces de bouée, on observe une déviation importante par rapport au comportement linéaire attendu dans la région dominée par la turbulence. Ces déviations sont d'autant plus importantes que le nombre de Froude est petit. Les forces de bouée, en surélevant le jet du sol par rapport au jet libre en l'absence de gravité, rendent également le comportement des jets subsoniques avec un nombre de Froude faible est moins dépendant de la proximité de la surface que les jets avec un nombre de Froude élevé.



**Figure 24.** Concentration de jets d'hydrogène à 0.05m du sol et les jets libres correspondants en fonction de la distance.

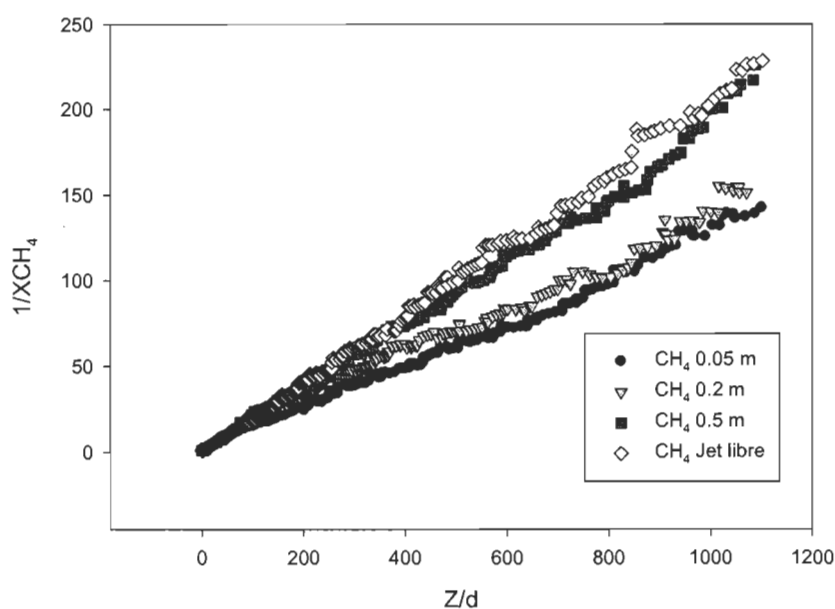


**Figure 25.** Concentration de jets d'hydrogène à 0.2m du sol et les jets libres correspondants en fonction de la distance.



**Figure 26.** Concentration de jets d'hydrogène à 0.5m du sol et les jets libres correspondants en fonction de la distance.

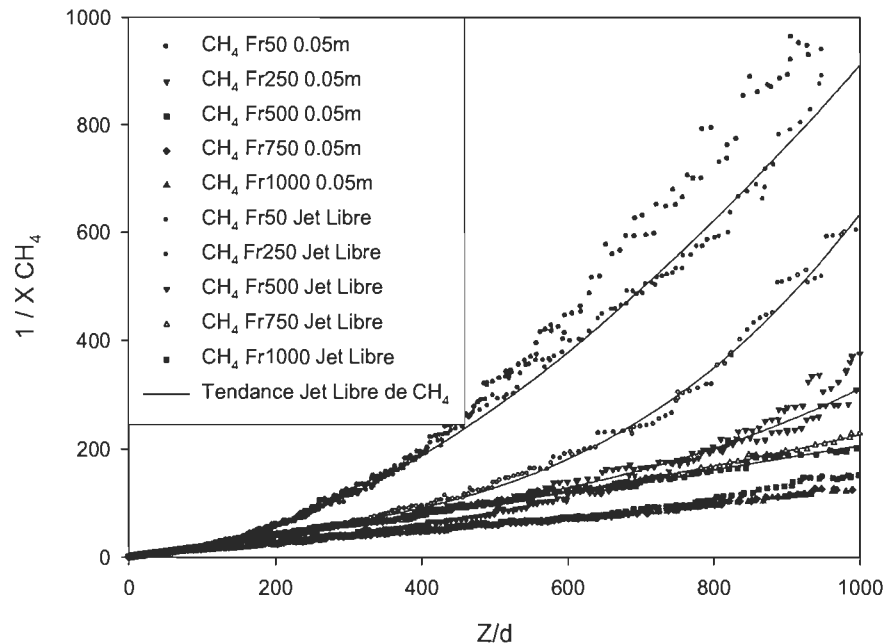
L'analyse pour les jets de méthane donne des résultats similaires à ceux obtenus pour l'hydrogène. La figure 27 montre le comportement de l'inverse de la concentration molaire en fonction de la distance normalisée pour le jet le moins influencé par la gravité, dont le nombre de Froude est égal à 1000 (voir les tableaux 16 à 19). On constate encore une modification de pente en fonction de la proximité au sol, vraisemblablement associé au changement des moments des fonctions d'échelle des champs de vitesse et de concentration.



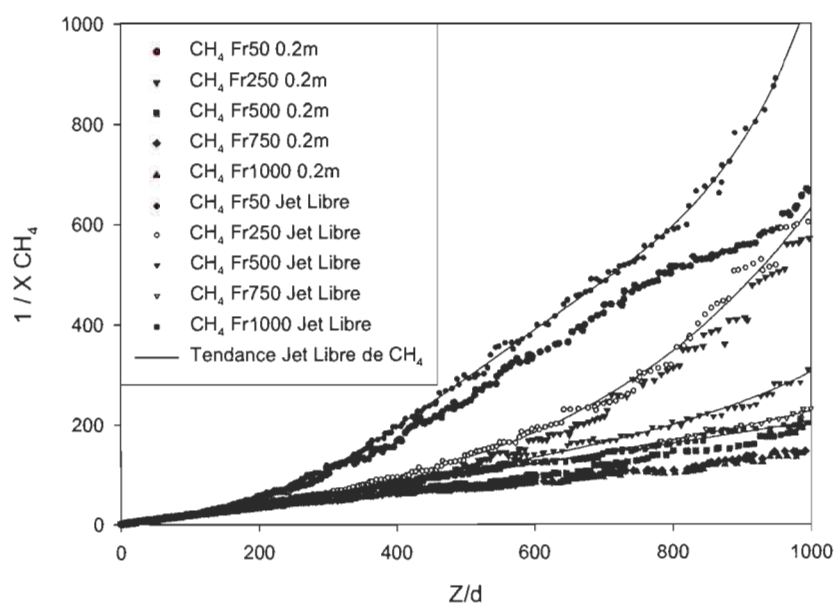
**Figure 27.** Comparaison entre les jets de méthane aux différents hauteurs respect du sol, pour Froude 1000 et son respective jet libre, pour l'inverse de la fraction molaire en fonction de la distance normalisé par le diamètre.

Les résultats détaillés de l'inverse du profil de concentration en fonction de la distance pour chaque hauteur de l'orifice sont présentés dans les figures 28 à 30. De façon générale, à cause de l'effet des forces de bouée, on observe une déviation par rapport au comportement linéaire attendu dans la région dominée par la turbulence, mais cette déviation est moins importante que pour l'hydrogène. La figure 28 montre un comportement inverse pour le jet de surface avec  $Fr=50$  par rapport aux résultats obtenus pour l'hydrogène et les autres jets de surface du méthane, au sens où l'inverse de la concentration du jet de surface est supérieur à celui du jet libre correspondant.

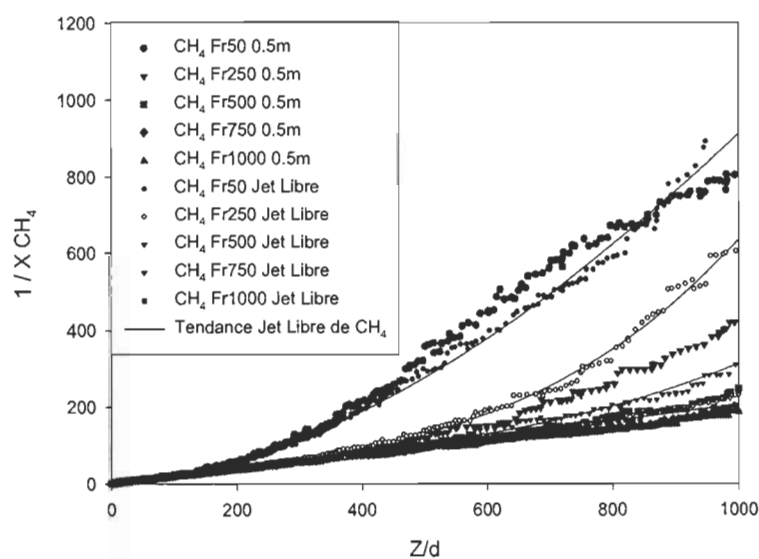
Le jet de méthane à  $Fr=50$  correspond à un faible débit volumétrique à l'origine, avec une vitesse d'injection de 10 m/s, par rapport à 45 m/s environ pour l'hydrogène pour le même nombre de Froude. Il s'est donc avéré difficile à simuler correctement ce cas avec FLUENT, et le maillage utilisé a dû être modifié pour obtenir une meilleure convergence. Dans ce contexte il serait imprudent de chercher à analyser et interpréter les résultats pour  $Fr=50$  pour le méthane sans simulations additionnelles. Ce problème se manifeste également dans les figures 29 et 30, où la courbure du profil de l'inverse de la concentration pour  $Fr=50$  ne s'accorde pas avec les comportements du jet libre correspondant et des autres nombres de Froude.



**Figure 28.** Concentration de jets de méthane à 0.05m du sol et les jets libres correspondants en fonction de la distance. Les jets de surface à  $Fr=750$  et  $Fr=1000$  sont superposés sur cette figure.



**Figure 29.** Concentration de jets de méthane à 0.2m du sol et les jets libres correspondants en fonction de la distance.



**Figure 30.** Concentration de jets de méthane à 0.5m du sol et les jets libres correspondants en fonction de la distance.

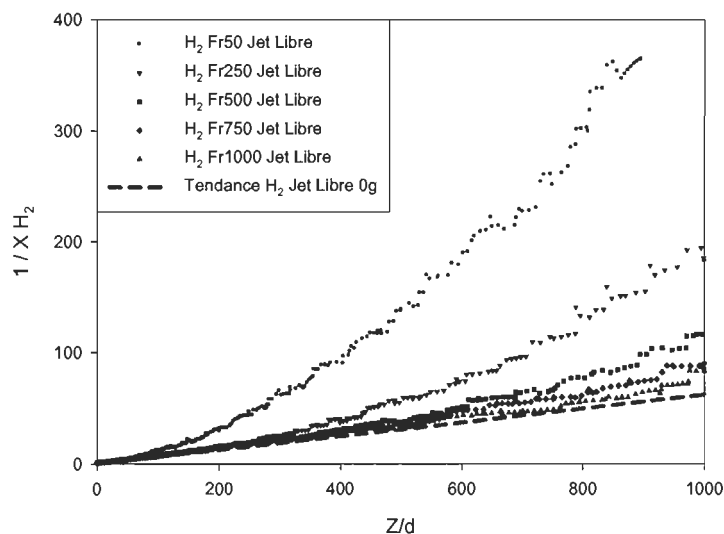
### 3.3.5.2 Effet de la gravité sur les jets d'hydrogène et de méthane sur le profil de concentration

Les jets libres d'hydrogène ainsi que les jets de surfaces à 5 cm et à 20 cm du sol ont été simulés en absence de la gravité et comparés au comportement des jets correspondant en fonction du nombre de Froude. De façon générale, on constate que les courbes de l'inverse de la concentration massique en fonction de la distance affichent une croissance monotone qui tend à devenir linéaire loin de l'orifice.

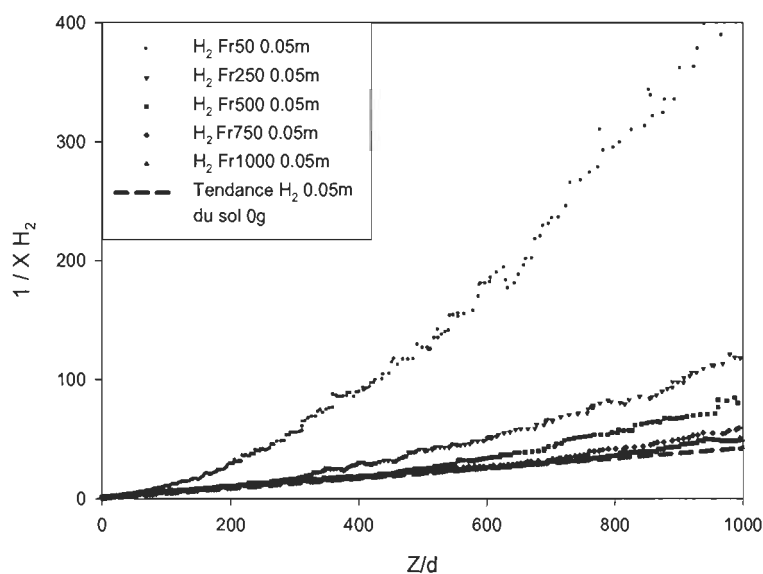
La figure 31 compare le comportement du jet libre en fonction du nombre de Froude au jet libre d'hydrogène en l'absence de gravité. Tel que discuté plus haut (section 3.3.1), les jets libres subsoniques d'hydrogène, en l'absence de gravité, ne dépend que faiblement du débit. On note sans surprise que plus le nombre de Froude est élevé et que le jet est dominé par la quantité de mouvement, plus la courbe se rapproche du cas sans gravité.

Les figures 32 et 33 illustrent l'effet de la présence d'une surface sur le profil de concentration. On constate également que, de façon générale, plus l'orifice est proche du sol, plus les courbes ont tendance à se rapprocher de la courbe de référence en l'absence de gravité. Ce comportement n'est pas surprenant puisque plus le jet est près du sol, plus il subit rapidement l'effet de la présence de la surface.

Finalement, la figure 34 montre les résultats pour les jets libres de méthane en fonction du nombre de Froude. On constate sans surprise une variation moins forte du comportement en fonction du nombre de Froude, comparée à l'hydrogène (figure 31). Notons que l'échelle de l'inverse de la concentration varie de 1 à 400 pour l'hydrogène et de 1 à 1000 pour le méthane, ce qui suggère un effet nettement plus important de la gravité pour l'hydrogène.

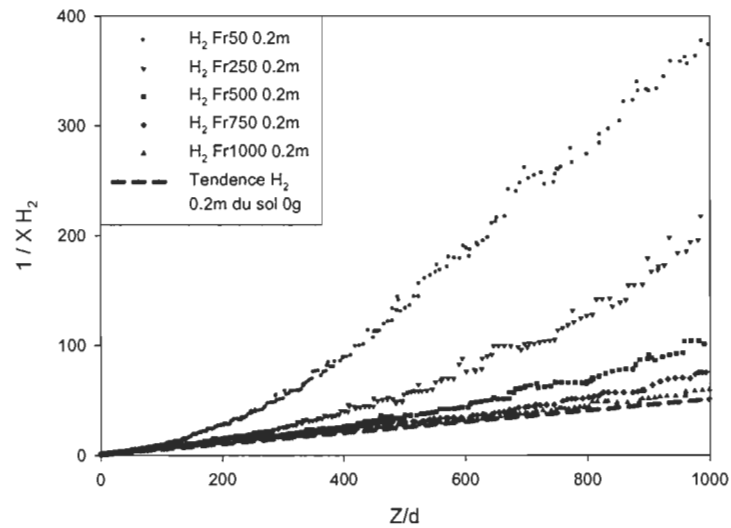


**Figure 31.** Comparaison des courbes de l'inverse de la concentration d'hydrogène en fonction de la distance normalisée par le diamètre de l'orifice, pour des jets libres d'hydrogène correspondant à des nombres de Froude variant de 50 à 1000 et pour des jets libres d'hydrogène en l'absence de gravité.

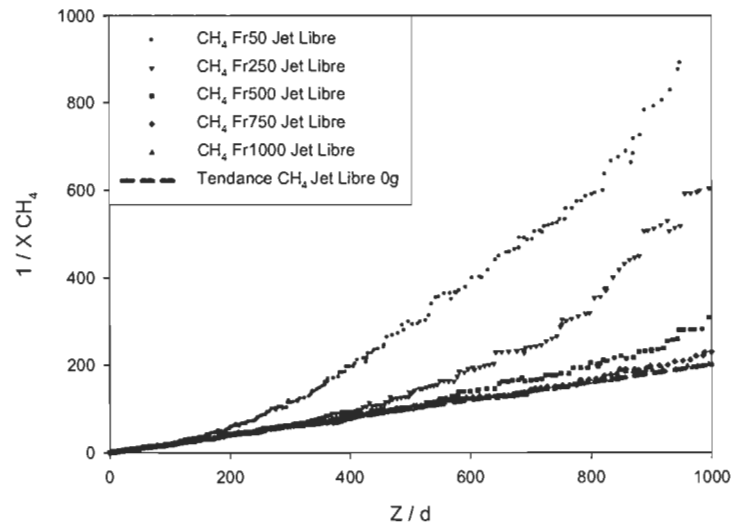


**Figure 32.** Comparaison des courbes de l'inverse de la concentration d'hydrogène en fonction de la distance normalisée, pour des jets libres associés à des nombres de Froude variant de 50 à 1000 et pour des jets libres d'hydrogène en l'absence de gravité. L'orifice du jet est situé à 5 cm du sol.





**Figure 33.** Comparaison des courbes de l'inverse de la concentration d'hydrogène en fonction de la distance normalisée par le diamètre de l'orifice, pour des jets libres d'hydrogène associés à des nombres de Froude variant de 50 à 1000 et pour des jets libres d'hydrogène en l'absence de gravité. L'orifice du jet est situé à 20 cm du sol.



**Figure 34.** Comparaison des courbes de l'inverse de la concentration de méthane en fonction de la distance normalisée par le diamètre de l'orifice, pour des jets libres de méthane associés à des nombres de Froude variant de 50 à 1000 et pour des jets libres de méthane en l'absence de gravité.

## CHAPITRE IV : CONCLUSIONS

Nous avons présenté une étude numérique par la méthode des volumes finis des propriétés de jets d'hydrogène et de méthane dans l'air en régime subsonique en présence d'une surface. Les différences de propriétés comme la densité et le coefficient de diffusivité des deux gaz considérés, font de l'hydrogène un gaz plus sensible aux effets de la flottaison tandis que le méthane est plus sensible aux changements de la quantité de mouvement. Le modèle numérique était basé sur le modèle k-epsilon réalisable. Ce modèle a été validé à l'aide des données expérimentales et des corrélations expérimentales disponibles, couvrant un large éventail d'écoulements, en 2 D et en 3D. Les simulations ont été effectuées sur cinq valeurs du nombre de Froude pour l'hydrogène et de méthane couvrant sur une vaste gamme, allant de 50 à 1000. Nous avons également fait des simulations de jet en l'absence de gravité, afin d'isoler l'effet de la gravité sur le comportement des jets.

Nous avons développé un modèle analytique décrivant le comportement d'un jet subsonique dans la région développée d'un jet en l'absence de gravité. Les résultats des simulations ont été analysés dans le contexte de ce modèle. Nous avons trouvé que le comportement des jets était adéquatement décrit par le modèle analytique tant pour l'hydrogène que pour le méthane, prédisant notamment le fait que l'étendue des jets de méthane était indépendant du débit en régime subsonique, contrairement au régime supersonique. Les faibles déviations de ce comportement par rapport au modèle, observées pour l'hydrogène, peuvent probablement s'expliquer par la dépendance des régions d'induction et de transition sur le débit. Nous avons trouvé qu'en l'absence de la gravité, le profil de l'inverse de la concentration varie linéairement avec la distance, en accord avec le modèle analytique. En présence de la gravité, on observe une déviation de ce comportement. Le modèle prédit également un rapport d'environ 3.65 entre les étendues inflammables d'hydrogène et de méthane, en bon accord avec les résultats des simulations, lesquelles prédisent une valeur située entre 3.55 et 4.18.

La présence d'une surface augmente la taille des régions inflammables (d'un facteur variant entre 50 et 65 % en présence de gravité et d'un facteur entre 180 et 208 % en l'absence de gravité). Cette différence provient de l'effet des forces de bouée sur le jet, et se trouve ainsi à être particulièrement manifeste pour les jets d'hydrogène.

Notons que pour le méthane, le cas correspondant au nombre de Froude le plus faible ( $Fr=50$ ) a donné des résultats discutables, sans doute à cause de la difficulté d'obtenir une convergence adéquate pour des écoulements fluides à faible vitesse (10 m/s) avec le modèle de turbulence k-epsilon réalisable.

La dépendance linéaire de l'inverse de la concentration molaire sur la distance est préservée même en présence d'une surface : il semblerait donc que la présence d'une surface préserve le comportement en loi d'échelle du jet dans la région développée. Ceci serait cohérent avec le fait que le développement des couches limites près de la surface et près de l'axe du jet se fait suivant le même mécanisme, c'est-à-dire la dispersion de l'hydrogène est régie par les tourbillons turbulents, lesquels sont caractérisés par une seule taille caractéristique qui croît avec la distance à l'origine. Ce comportement d'échelle est également suggéré par notre étude de l'étendue en excès normalisée (NRE). Une étude de l'évolution du profil de concentration molaire, en fonction de la distance axiale et radiale permettra de vérifier cette hypothèse. Une étude détaillée de la région d'induction et de transition en fonction du débit permettra également de mieux qualifier et quantifier leur rôle dans la détermination des étendues inflammables.

## CHAPITRE V : ANNEXES

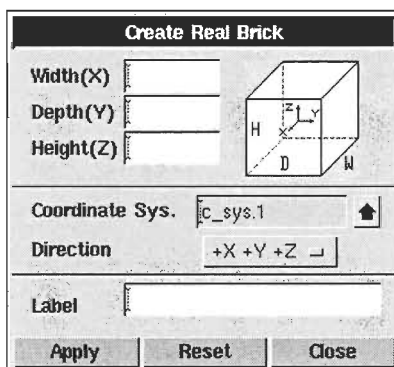
Les annexes visent à donner un aperçu global du logiciel utilisé pour la réalisation des modélisations des jets d'hydrogène et de méthane. Ici on décortique d'une manière simple la procédure suivie pour lancer une simulation, en commençant par la géométrie et le maillage et en finissant par la configuration du modèle physique propre à la dispersion des jets de gaz subsoniques.

### Annexe A : Gambit

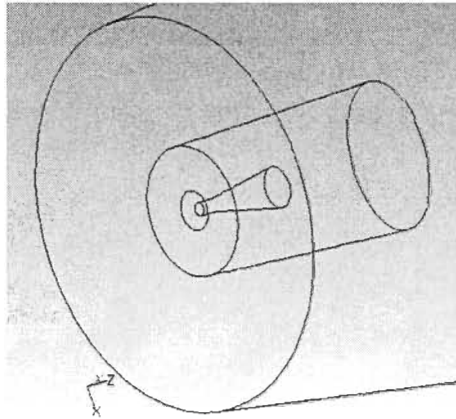
La description de la création de la géométrie et du maillage dans ce travail est présentée en utilisant comme guide le manuel de l'utilisateur de FLUENT et Gambit.

Bien qu'il existe des possibilités multiples pour la création de la géométrie et du maillage, nous nous limiterons ici aux logiciels Gambit et Workbench décrit en annexe B.

Gambit est un logiciel CAD élémentaire qui dispose des outils nécessaires à la création de géométries complexes comme : l'intersection, l'union, la différence ou l'extraction de volumes ou de surfaces. Les figures 35 et 36 montrent respectivement l'interface pour la création d'un volume et un exemple de géométrie créée.



**Figure 35.** Interface pour la création d'un volume.

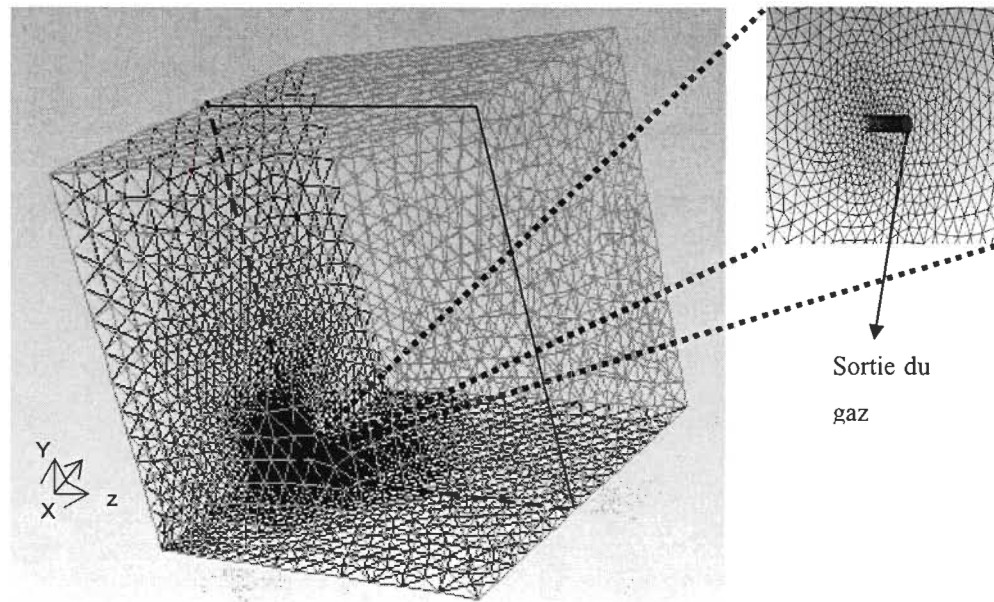


**Figure 36.** Exemple de géométrie avant de mailler.

Après la création d'une géométrie, on procède à la génération du maillage de type non-structuré comme c'est notre cas dans la majorité des scénarios étudiés. Cette forme de maillage peut être construite de façon simple, facile et rapide, en adaptant d'une manière plus coordonnée la forme du maillage aux différents contours de la géométrie, d'autant plus que le logiciel a la possibilité de raffiner et de concentrer les mailles dans les zones où il est nécessaire d'obtenir plus de précision.

Il y a deux méthodes simples pour la création d'un maillage : la première consiste à définir un certain nombre de points appelés nœuds, sur les contours du domaine, et à partir de ces points le système va générer des mailles sur les surfaces et des éléments de volumes à l'intérieur du domaine.

La deuxième façon est la création du maillage par les fonctions de croissance, qui est un algorithme qui permet de contrôler la croissance de la taille de maille de façon graduelle et systématique.

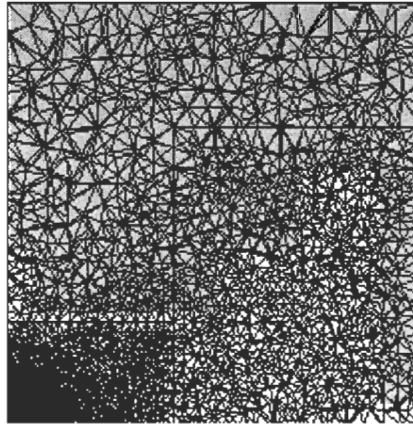


**Figure 37.** Géométrie du domaine du jet avec l'agrandissement de la zone où se trouve l'orifice correspondant à la sortie du gaz.

Pour la création d'une fonction de croissance, il faut définir :

- La taille de départ.
- Le taux de croissance.
- La taille limite.

La taille de départ est la longueur d'un élément du maillage qui appartient à une entité source. Gambit permet d'utiliser comme entités les sommets, les axes, les faces ou les volumes. Le taux de croissance représente l'augmentation de la longueur de l'élément au fur et à mesure que le maillage s'éloigne de l'entité source. La taille limite spécifie la longueur maximale admissible pour un élément du maillage. Finalement, ces paramètres doivent être attachés à une entité, soit un axe, une face ou un volume, où la fonction contrôlera la croissance de la maille (figures 37 et 38).



**Figure 38.** Exemple d'un maillage en utilisant les fonctions de croissance.

La figure 38 représente une coupe sur le plan de symétrie du maillage d'un domaine en 3 dimensions dont l'entité source se trouve au côté bas gauche.

## Annexe B : Workbench

La version de FLUENT 12.1 a changé totalement la façon de la création de la géométrie et le maillage. Cette nouvelle version comprend un nouveau système de logiciel CAD plus avancé que Gambit, avec des modules qui s'intègrent l'un à l'autre, à travers un processus en chaîne, qui permet la construction du maillage dans un ordre logique (voir les figures 39 et 40).

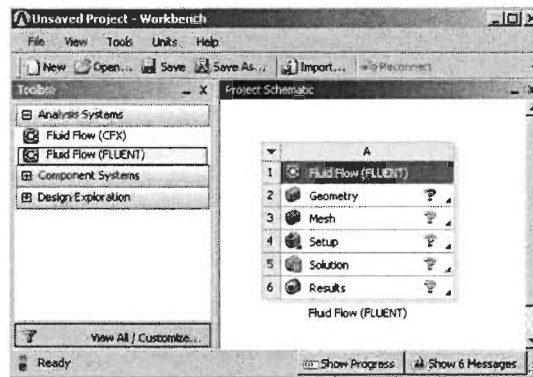


Figure 39. Interface d'entrée de Workbench

Le logiciel est similaire à Autocad. Il permet de créer une géométrie en s'appuyant sur des opérations booléennes comme l'addition, la soustraction, l'union ou l'intersection des différentes entités jusqu'à la création de la géométrie finale.

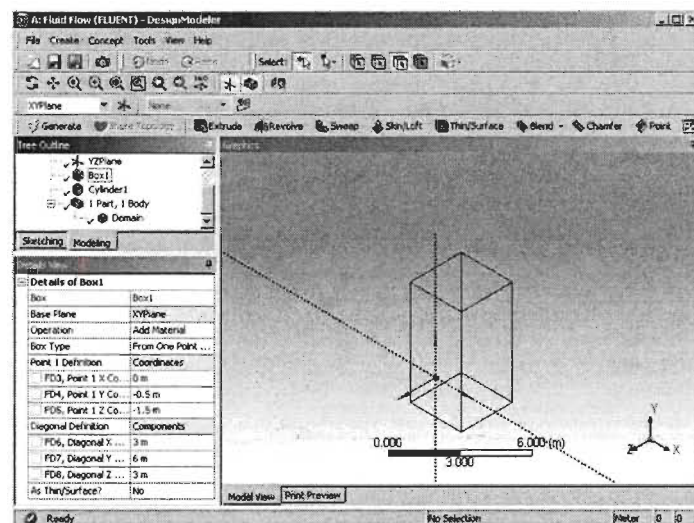
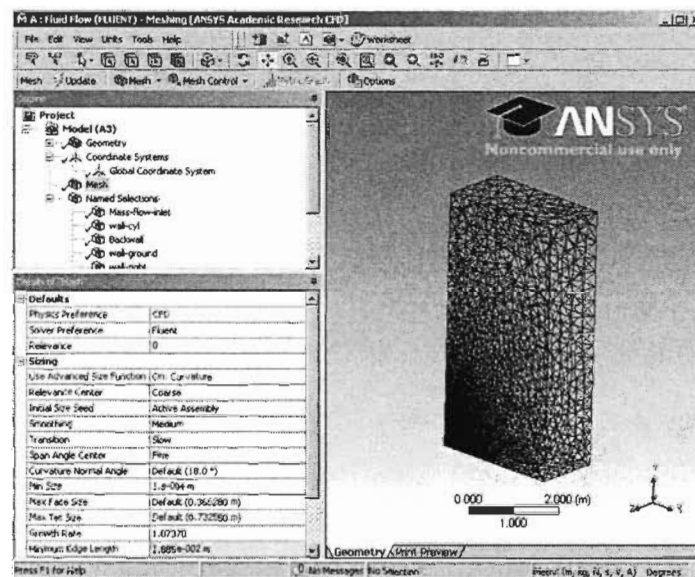


Figure 40. Création de la géométrie par Workbench.



La construction du maillage en Workbench, consiste à organiser la croissance du maillage sous une forme graduelle du plus petit élément jusqu'au plus grand (figure 41). Pour cela, il est nécessaire de définir la taille minimale de la maille, qui correspond naturellement au plus petit élément géométrique du domaine, les tailles maximales et minimales des faces des éléments du maillage, ainsi que le taux de croissance du maillage. Ce dernier paramètre nous permet d'avoir un agrandissement progressif de la maille et de concentrer les éléments de maillage dans la zone où la variation des grandeurs physiques est plus importante lors de la simulation.



**Figure 41.** Création du maillage par Workbench.

## Annexe C : FLUENT

Le logiciel « FLUENT » permet de résoudre numériquement les problèmes de la mécanique des fluides. L'un des intérêts de ce logiciel de simulation généraliste est qu'il dispose d'un nombre relativement important de modèles, pouvant faire face à divers aspects de la mécanique des fluides. Basé sur la méthode des volumes finis, ce logiciel est suffisamment robuste pour l'étude de notre problème.

### C.1 Théorie

Pour l'étude des écoulements de fluide, le programme FLUENT résout les équations de la conservation de masse et de la quantité de mouvement. Pour un écoulement compressible et turbulent, il faut aussi résoudre l'équation de transport et de conservation d'énergie. La forme générale de l'équation de la conservation de masse est la suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\delta}{\delta x_i}(\rho u_i) = s_m \quad (100)$$

Cette expression est valide pour les écoulements aussi bien compressibles qu'incompressibles.

La conservation de la quantité de mouvement dans une direction  $i$  dans un système de référence inertiel est :

$$\frac{\delta}{\delta t}(\rho u_i) + \frac{\delta}{\delta x_j}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\delta \tau_{ij}}{\delta x_j} + \rho g_i + F_i \quad (101)$$

où  $p$  est la pression statique,  $\tau_{ij}$  est le tenseur de contraintes,  $\rho g_i$  and  $F_i$  sont respectivement, la force gravitationnelle et les forces externes.

L'expression pour  $\tau_{ij}$  est définie par :

$$\tau_{ij} = \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij} \quad (102)$$

où  $\mu$  est la viscosité moléculaire, le deuxième terme à droite, est dû à l'effet de la dilatation du volume.

L'équation d'énergie s'exprime de la façon suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\delta}{\delta x_i}(u_i(\rho E + p)) = \frac{\delta}{\delta x_i}\left(k_{eff} \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_j h_j J_j + u_j(\tau_{ij})_{eff}\right) + S_h \quad (103)$$

$K_{eff}$  est la conductivité effective,  $J_j$  est le flux d'espèces  $j$ .

Les trois termes dans la grande parenthèse à droite représentent le transfert d'énergie dû à la conduction, à la diffusion des espèces et à la dissipation visqueuse.

$S_h$  comprend la chaleur de la réaction chimique et aussi d'autres possibles sources de chaleur.

Pour l'expression précédente les valeurs de  $E$  et  $h$  (l'enthalpie) sont définies par :

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{u_i^2}{2} \quad h = \sum_j m_j h_j, \quad h_j = \int_{T_{ref}}^T C_{p,j} dT \quad (104)$$

où  $m_j$  est la fraction massique de l'espèce.

## C.2. Forces de flottaison

Le changement de densité dû à la variation de température dans un écoulement peut être induit par les forces de gravité.

Les forces de flottaison peuvent être mesurées par la relation entre le nombre de Grashof  $Gr$  et le nombre de Reynolds  $Re$  :

$$\frac{Gr}{Re^2} = \frac{\Delta \rho g h}{\rho \nu^2} \quad (105)$$

Quand le nombre de Grashof s'approche de l'unité ou excède l'unité, on doit s'attendre à de grandes influences de la flottaison sur l'écoulement. Pour le cas contraire, si la valeur est inférieure à l'unité, les forces de flottaison peuvent être négligées et l'écoulement sera plutôt dominé par la quantité de mouvement.

## C.3. L'écoulement compressible

Les effets de compressibilité se rencontrent dans les cas des écoulements gazeux à haute vitesse et/ou il y a de larges variations de pression. Quand la vitesse de l'écoulement dépasse ou est proche de la vitesse du son du gaz, alors la variation de la densité a des effets très importants sur les valeurs de la vitesse de l'écoulement, la pression et de la température.

Les écoulements compressibles peuvent être caractérisés par le nombre de Mach  $M = u/c$ , où  $u$  est la vitesse du jet et où  $c = \sqrt{\gamma RT}$  est la vitesse du son du gaz étudié,  $\gamma$  étant le rapport des chaleurs spécifiques ( $\gamma = c_p/c_v$ ). Lorsque la valeur du nombre de Mach est inférieure à 0.1, les effets de la compressibilité et la variation de la densité avec la pression peuvent être négligés. Au fur et à mesure que le nombre est plus proche de la valeur de l'unité, la compressibilité devient importante.

Les écoulements compressibles sont souvent caractérisés par la pression totale  $p_0$  et la température totale  $T_0$ . Pour les gaz idéaux isentropiques, ils sont reliés au nombre de Mach via les expressions suivantes :

$$\frac{p_0}{p_s} = \left[1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right]^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad \frac{T_0}{T_s} = 1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2 \quad (106)$$

Pour les gaz compressibles, la loi des gaz parfaits est:

$$\rho = (p_{op} + p)/RT_s \quad (107)$$

où  $p_{op}$  est la pression d'opération (la pression ambiante dans notre cas) et  $p$  la pression statique relative à la pression d'opération (elle est aussi nommée la pression de jauge),  $R$  est la constante de gaz parfaits  $T_s$  est calculée à partir de l'équation d'énergie.

#### C.4. Description du modèle de turbulence k-ε réalisable

Un avantage important du modèle réalisable est qu'il prévoit plus exactement le taux de dispersion des jets plans et ronds. Il est susceptible également de fournir une meilleure description des écoulements qui comportent des mouvements de rotation, des couches limites, qui subissent l'influence de forts gradients de pression, et qui affiche des phénomènes de séparation et de recirculation.

Les équations de transport pour  $k$  et  $\varepsilon$  pour le modèle k-ε réalisable, sont :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (108)$$

et

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \varepsilon u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S_\varepsilon - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_b + S_\varepsilon \quad (109)$$

où  $C_1 = \text{Max}(0.43, \eta/(\eta + 5))$ ,  $\eta = S k/\epsilon$ ,  $S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$ .  $S$  est la norme du tenseur de déformation,  $\epsilon$  le taux de dissipation,  $k$  l'énergie cinétique,  $S_\epsilon$  et  $S_k$  sont des termes sources définies par l'utilisateur,  $G_k$  et  $G_b$  sont les taux de production de l'énergie cinétique turbulente dû aux gradients de la vitesse moyenne et aux forces de flottaison respectivement,  $Y_M$  représente la contribution de la dilatation fluctuante de la compressibilité,  $C_2$  et  $C_{1\epsilon}$  sont des constantes universelles à déterminer,  $C_{3\epsilon}$  est une constante relié à la flottaison,  $\nu$  est la viscosité dynamique du fluide,  $\mu$  est la viscosité cinématique du fluide,  $\rho$  est la densité du fluide,  $u$  est la vitesse du fluide et  $\sigma_\epsilon$  et  $\sigma_k$  sont les nombres de Prandtl pour  $k$  et  $\epsilon$  respectivement<sup>4</sup>.

Les valeurs des constantes ont été établies afin d'assurer la bonne performance du modèle pour certaines fluides canoniques :

$$C_{1\epsilon} = 1.44, C_2 = 1.9, \sigma_k = 1.0, \sigma_\epsilon = 1.2$$

#### C.4.5. Spécification uniforme des paramètres de la turbulence

Afin de résoudre les équations décrivant la turbulence il est nécessaire de spécifier des conditions aux frontières propres à la turbulence. Il est d'usage de spécifier ces conditions sous la forme de l'intensité turbulente, du diamètre hydraulique ou de la taille caractéristique des tourbillons responsables de la turbulence.

L'intensité turbulente est définie comme le rapport entre la racine carrée des fluctuations moyennes de la vitesse  $u$  et de la vitesse moyenne de l'écoulement,  $\bar{u}$ . Une valeur de 1 % ou moins est considérée comme basse et les valeurs plus grandes que 10 % sont considérées élevées. L'intensité turbulente peut être calculée, pour un problème donné, à partir d'une corrélation empirique établie pour les écoulements internes dans des conduits :

$$I \equiv \frac{u'}{u_{avg}} \cong 0.16(Re_{DH})^{-1/8} \quad (110)$$

---

<sup>4</sup> Les expressions les constantes et variables impliqués dans les équations de transport sont trouvés dans les pages 4-18 et suivantes de le manuel de FLUENT 12.0 « Theory guide ».

L'échelle de la longueur de la turbulence,  $\ell$  est une quantité physique reliée à la taille caractéristique des tourbillons des écoulements turbulents. Par exemple, pour les fluides développés (turbulents) dans des conduits, la valeur de  $\ell$  correspond à la taille du conduit, étant donné que la taille des tourbillons associés à la turbulence est limitée par le diamètre du conduit. Une relation approximative entre  $\ell$  et la taille du conduit est :

$$\ell = 0.07L \quad (111)$$

où  $L$  est le diamètre du conduit dans le cas d'un conduit circulaire.

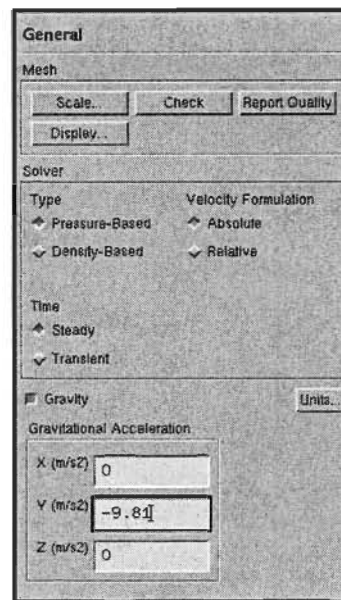
### **C.5. Configuration de FLUENT**

La configuration de FLUENT pour les simulations sera présentée ici-bas au moyen de captures d'écrans du logiciel FLUENT.

#### **C.5.1. Choix du solveur**

Le lancement de la simulation débute avec le choix du solveur tel qu'illustré sur la figure 42 . Cette boîte de dialogue permet de définir les options suivantes :

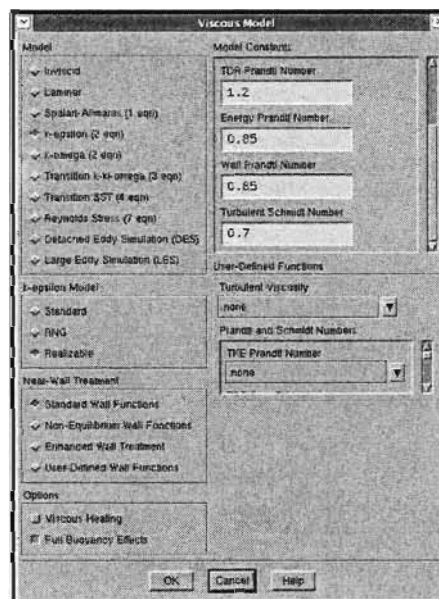
- Le solveur « pressure-based » est sélectionnée en raison de :
  - Le cas à étudier est un jet en régime subsonique.
  - La valeur de la pression totale à la sortie du jet est égale à la pression atmosphérique.
- Le régime stationnaire est sélectionné.
- La valeur et la direction de l'accélération de la pesanteur sont définies.



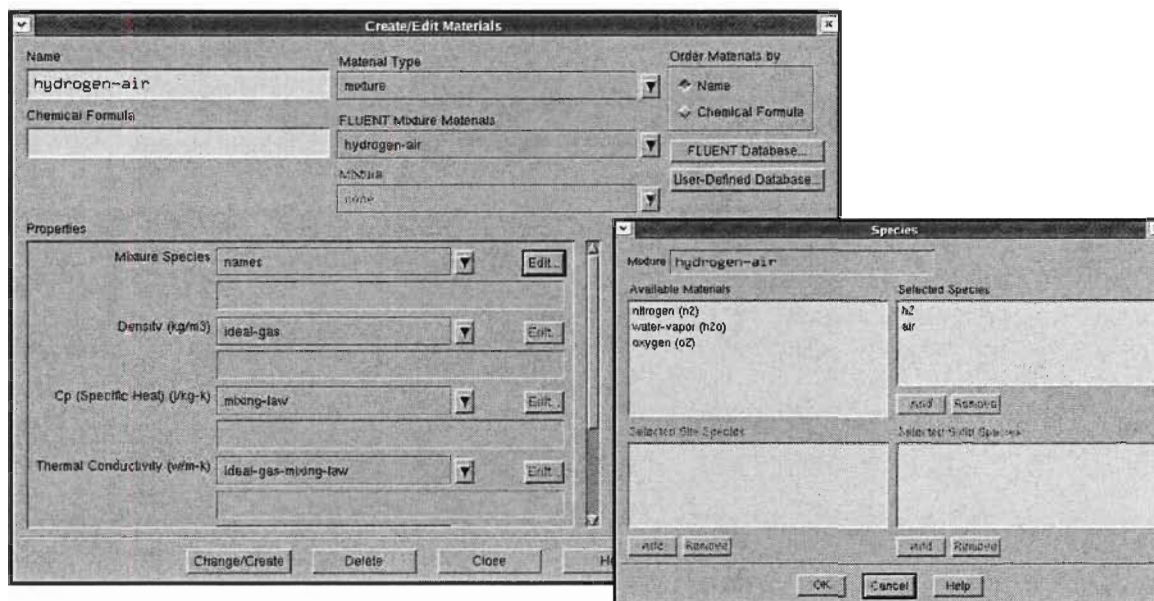
**Figure 42.** Information générale FLUENT.

### C.5.2. Choix du model de turbulence et des matériaux à étudier

Le modèle de turbulence k- $\epsilon$  réalisable est choisi, avec les paramètres par défaut et en activant les effets de flottaison, voir la figure 43.



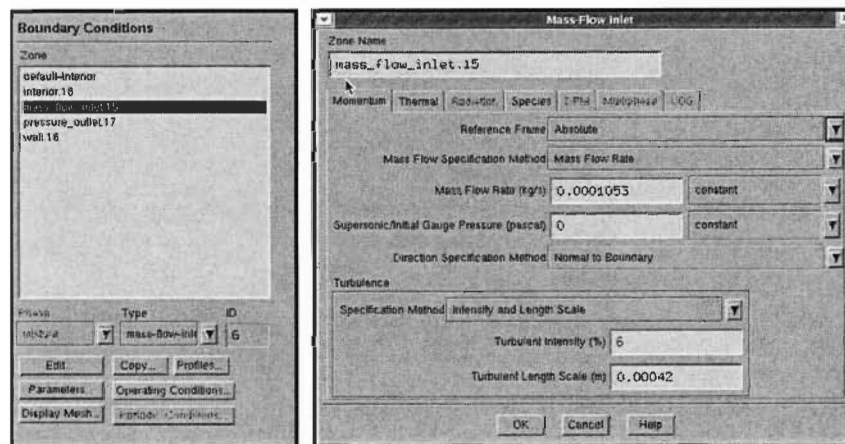
**Figure 43.** Modèle de turbulence.



**Figure 44.** Sélection et configuration des variables pour les matériaux.

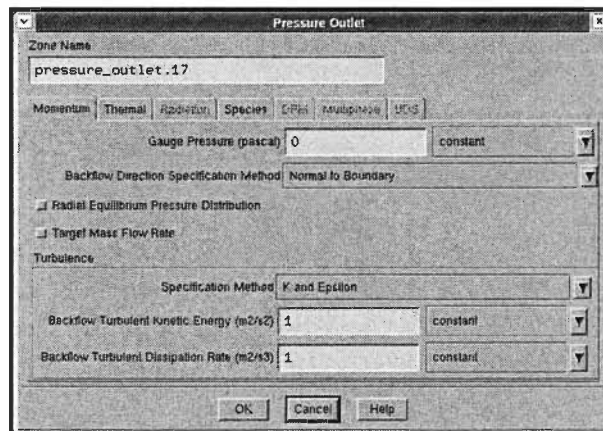
Ensuite la configuration des composantes pour le mélange des gaz, et les paramètres physiques pour les différentes espèces du mélange en question comme la diffusivité massique, la viscosité, la conductivité thermique entre autres sont sélectionnés, ainsi que la loi des gaz parfaits lesquelles sont utilisées pour calculer l'évolution des propriétés thermodynamiques du mélange tout au long de la dispersion du gaz, voir la figure 44.

### C.5.3. Choix des conditions aux frontières



**Figure 45.** Conditions de frontière pour le débit du gaz.

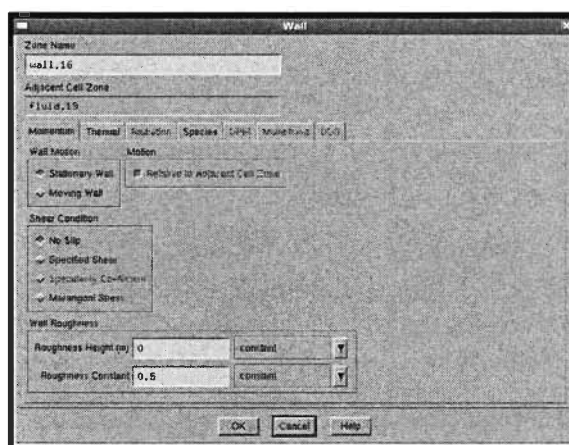




**Figure 46.** Conditions de frontière pour « pressure outlet ».

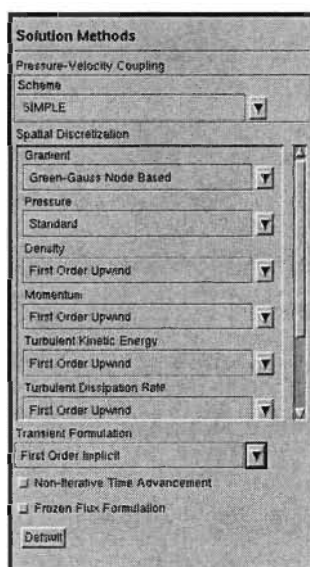
Dans notre cas , les seules conditions aux frontières utilisées sont :

- La sortie du gaz choisie comme : Mass Flow rate où on définit le débit du gaz, ainsi que la pression et les paramètres de turbulence à cette sortie (figure 45).
- Le plafond est défini comme « pressure outlet » (figure 46).
- Toutes les surfaces délimitant le domaine de simulation sauf le plafond sont définies comme « wall» (figure 47).



**Figure 47.** Conditions de frontière pour « wall ».

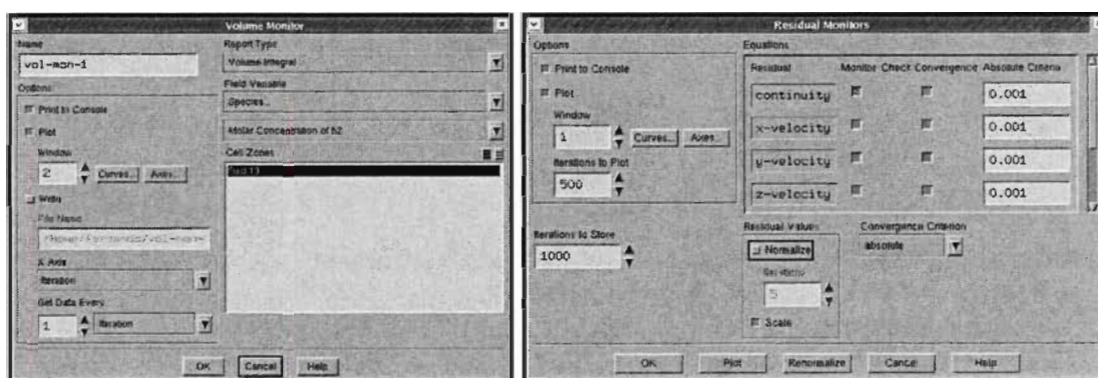
### C.5.4 Configuration des paramètres de discrétisation pour la solution



**Figure 48.** Configuration des méthodes de solution.

Au début de la simulation, les paramètres de discrétisation temporelle et spatiale sont au premier ordre. On peut les mettre au deuxième ordre (pour avoir une solution plus précise) après quelques itérations, figure 48.

### C.5.5. Choix des critères de convergence

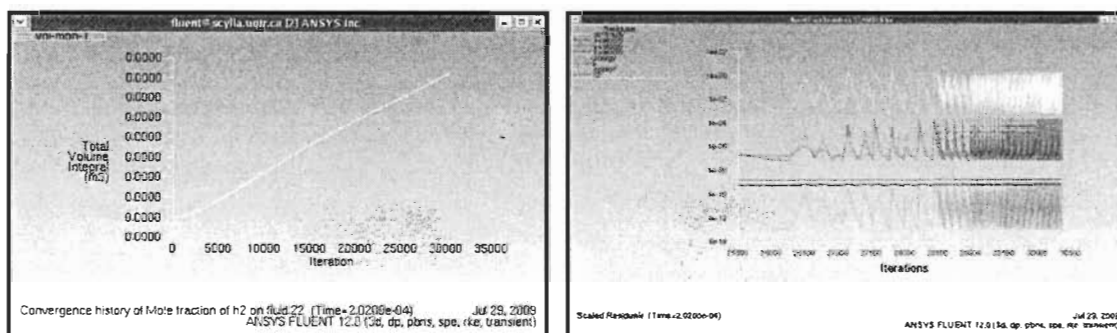


**Figure 49.** Choix et affichage pendant les calculs des critères de convergence.

Il s'agit ici de choisir les critères de convergences qui doivent être vérifiés pour que les calculs de la simulation arrivent à trouver une solution spécifique. Pour afficher la

convergence à l'écran pendant les calculs sous forme de graph, il faut activer l'option « Plot et Print to Console ».

Les résidus sont calculés à partir des corrections dans les variables suivantes : pression, vitesse, température, etc. entre l'itération en cours et l'itération précédente. Dans la plupart des cas, le critère de convergence par défaut dans FLUENT (basé sur le *résidu*) est suffisant. La solution est considérée comme convergée quand les résidus atteignent une valeur de  $10^{-3}$ . Toutefois, dans certains cas il faut pousser les calculs à  $10^{-4}$  ou  $10^{-6}$  afin d'obtenir des résultats plus précis. Il n'y a pas de règle générale. Un autre critère de contrôle de la convergence consiste à afficher l'évolution de l'intégrale surfacique ou volumique d'une variable pendant les calculs. Ceci constitue un moyen de contre-vérifier que la solution est bien stable et de regarder son comportement dans le domaine (voir les figures 49 et 50).



**Figure 50.** Courbes de résidus et évolution de l'intégrale du volume de la concentration

## BIBLIOGRAPHIE

- [1] ABRAMOVICH, G. N. 1963. The Theory of Turbulent Jets, MIT Press.
- [2] BIRCH, A.D., BROWN, D.R., DODSON, M.G., and SWAFFILED, F. 1983. The Structure and Concentration Decay of high Pressure Jets of Natural Gas, Combustion Science and Technology 36: pp. 249-261.
- [3] BIRCH, A.D., HUGHES, D.J., and SWAFFILED, F. 1986. Velocity Decay of High Pressure Jets, Combustion Science and Technology 52: pp. 161-171.
- [4] CHEN, C.J., RODI, W. 1980. Vertical turbulent buoyant jets, a review of Experimental Data. HMT. Pergamon Press, Oxford. vol. 4
- [5] CHEN, C.J., RODI, W. 1978. On the decay of vertical buoyant jets in uniform environment. Proceedings of 6<sup>th</sup> International Heat Transfer Conference, pp. 97-102.
- [6] FLUENT Version 12.1 Canonsburg, PA: Canonsburg, PA 2009.
- [7] GAZZAH M.H., Sassi M., Brahim S., Gökalp I., Simulation numérique des jets turbulents subsoniques à masse volumique variable par le modèle  $k-\epsilon$ . International Journal of Thermal Sciences, Volume 41, Issue 1, January 2002, Pages 51-62
- [8] GUERRA, D., Modélisation du transfert d'un aérocontaminant dans un local ventilé, en champ proche d'une source d'émission, thèse institut national polytechnique de Toulouse (2004).
- [9] HOUF W.G., Schefer R.W., Williams T.C., Investigation of small-scale unintended releases of hydrogen: Buoyancy effects. Combustion Research Facility, Sandia National Laboratories, Livermore, CA 94551, USA. International journal of hydrogen energy 33 (2008) pp 4702 – 4712.
- [10] HOURRI A., Angers B., Bénard P., Surface effects on flammable extent of hydrogen and methane jets. International journal of hydrogen energy 34 (2009) 1569 – 1577
- [11] PITTS W.M., Effects of global density ratio on the centerline mixing behavior of axisymmetric turbulent jets. Center for Fire Research, National Institute of Standards and

Technology Gaithersburg, MD 20899, USA. Experiments in Fluids 11, pp 125-134 Springer-Verlag 1991.

[12] PAPANICOLAOU, P.N., List, E.J., Investigations of round vertical turbulent buoyant jets, Journal of Fluid Mechanics, vol. 195, pp 341-391 (1988).

[13] PARANJPE S., Remote detection of hydrogen leaks using laser induced Rayleigh/mie scattering Thesis University of Florida (2004).

[14] PERTHUIS, E. La combustion industrielle, Editions Technip, (1983)

[15] RAJARATNAM, N., Turbulent Jets, Elsevier (1976).

[16] SAUTET, J.C., STEPOWSKI, D., Evolution of the effective nozzle diameter in the buoyancy free development of turbulent jets with variable density, Experiments in Fluids, vol. 25, pp 280-282 (1998).

[17] SCHEFER. R.W., Houf W.G., Analytical and experimental investigation of small-scale unintended releases of hydrogen Sandia National Laboratories, Livermore, CA, USA, international journal of hydrogen energy 33 ( 2008 ) pp 1435 – 1444.

[18] SCHEFER R.W., Houf W.G., Williams T.C., Bourne B., Colton J. Characterization of high-pressure, underexpanded hydrogen-jet flames. International Journal of Hydrogen Energy 32 (2007) 2081 – 2093.

[19] SCHEFER R.W., Houf W.G., Williams T.C., Investigation of small-scale unintended releases of hydrogen: momentum-dominated regime. Combustion Research Facility, Sandia National Laboratories, Hydrogen and Combustion Technologies, 7011 East Avenue, Building 905, Room 169, Livermore, CA 94551, USA.) International journal of hydrogen energy 33 pp 6373 – 6384.

[20] SWAIN M.R., Filoso P.A., Swain M.N. Hydrogen leakage into simple geometric enclosures. International Journal of Hydrogen Energy 28 (2003) pp 229 – 248.